

**APROXIMACIÓN AL FENÓMENO DE MAGNETIZACIÓN PERMANENTE
MEDIANTE EL ESTUDIO DE LOS ELECTRONES DEL ORBITAL 4F DEL
COMPUESTO $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$**

SARA SOFÍA GARZÓN TÁUTIVA

**UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL
FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
LÍNEA DE PROFUNDIZACIÓN 2: LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA Y LA
RELACIÓN FÍSICA MATEMÁTICA
BOGOTÁ, DC
2023-2**

**APROXIMACIÓN AL FENÓMENO DE MAGNETIZACIÓN PERMANENTE
MEDIANTE EL ESTUDIO DE LOS ELECTRONES DEL ORBITAL 4F DEL
COMPUESTO Nd₂Fe₁₄B**

SARA SOFÍA GARZÓN TÁUTIVA

Trabajo de grado en modalidad de monografía para optar por el título de
Licenciada en Física

FERNANDO ISIDRO ESPITIA CASTAÑEDA
Magister en Ciencias-Física

UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL
FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
LÍNEA DE PROFUNDIZACIÓN 2: LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA Y LA
RELACIÓN FÍSICA MATEMÁTICA
BOGOTÁ, DC
2023-2

"Eres responsable de cómo la gente te recordará o, todo lo contrario. Así que no te lo tomes a la ligera. Si lo haces bien, tu juego vivirá en otros. Serás imitado por aquellos con los que jugaste, contra los que jugaste o los que nunca te vieron. Tienes que dejarte todo en la cancha. Dar lo mejor que tengas y cuando llegue el momento de que dejes esto, serás una leyenda".

-Kobe Bryant-

AGRADECIMIENTOS

Quisiera expresar mi profundo agradecimiento a todas las personas que contribuyeron de alguna manera al desarrollo y culminación de este trabajo de grado.

En primer lugar, quiero agradecer a mi director de tesis, Fernando Espitia, por su orientación, apoyo y dedicación a lo largo de todo el proceso de investigación. Sus valiosos consejos y sugerencias fueron fundamentales para dar forma a este trabajo y alcanzar los objetivos propuestos. Agradezco también a la profesora Sandra Ávila por mostrarme el amor hacia la física y el estado sólido, sin su motivación este trabajo no se hubiese realizado.

También quiero expresar mi gratitud a Juan Manuel Cardoso por su asesoramiento, su confianza plena, su paciencia y amor, y sus aportes significativos que enriquecieron este proyecto.

No puedo dejar de mencionar a mis compañeros/as de clase y amigos/as que estuvieron presentes durante este viaje académico. Su apoyo moral y palabras de aliento fueron un gran estímulo para seguir adelante en los momentos difíciles.

Por último, pero no menos importante, quiero agradecer a mi familia por su inquebrantable apoyo, comprensión y paciencia a lo largo de este proceso. Su amor y apoyo incondicional fueron mi mayor fortaleza y motivación para alcanzar este logro académico. A mi abuelita quien motivó todos mis estudios y por quien entrego orgullosa este trabajo.

A todas las personas mencionadas y a aquellas que de alguna manera contribuyeron a este trabajo, les expreso mi más sincero agradecimiento. Sin su ayuda, este trabajo no habría sido posible.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	10
1. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN	11
1.1. CONTEXTO PROBLEMA	11
1.2. OBJETIVOS	18
1.2.1. OBJETIVO GENERAL	18
1.2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
1.3. ANTECEDENTES	19
2. BREVE HISTORIA DE LOS IMANES PERMANENTES	20
3. MAGNETIZACIÓN PERMANENTE	27
3.2. CURVAS DE HISTÉRESIS	38
3.3. TEORÍA DE BANDAS	43
4. CRISTALOGRAFÍA DE LOS IMANES DE NEODIMIO	46
4.1. ANISOTROPÍA MAGNÉTICA	53
5. IMANES PERMANENTES Y APLICACIONES TECNOLÓGICAS	56
CONCLUSIONES	60
BIBLIOGRAFÍA	62
ANEXOS	66
Anexo A. Demostración de la función de Brillouin	66
Anexo B. Demostración Temperatura de Curie	72

LISTA DE TABLAS

	Pág.
TABLA 1. COMPARACIÓN DE LAS PROPIEDADES MAGNÉTICAS CARACTERÍSTICAS DE DOS TIPOS DE IMÁN PERMANENTE COMPUESTOS DE TIERRAS RARAS (Nd Y Sm). TOMADO DE (IMÁN DE NEODIMIO, 2023)	40

LISTA DE GRÁFICAS

	Pág.
GRÁFICA 1. PARTES DE LA CURVA DE HISTÉRESIS. LAS CURVAS MUESTRAN UNA RELACIÓN NO LINEAL. AUTORÍA PROPIA	39
GRÁFICA 2. CURVAS DE MAGNETIZACIÓN PARA MATERIALES BLANDOS (IZQ.) Y MATERIALES DUROS (DER.). AUTORÍA PROPIA	41
GRÁFICA 3. COMPORTAMIENTO DE LOS DOMINIOS MAGNÉTICOS A LO LARGO DEL CICLO DE HISTÉRESIS. AUTORÍA PROPIA.	42
GRÁFICA 4. PICOS DE DIFRACCIÓN DEL COMPUESTO $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. TOMADO DE (RYAN, 1993)	51
GRÁFICA 5. MAGNETIZACIÓN VS. INTENSIDAD MAGNÉTICA APLICADA EN UN CRISTAL DE $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. TOMADO DE (SAGAWA, FUJIMURA, YAMAMOTO, MATSUURA, & HIROSAWA, 1985)	54

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
FIGURA 1. MOVIMIENTO ORBITAL DEL ELECTRÓN ALREDEDOR DEL NÚCLEO SEGÚN EL MODELO DE BOHR. TOMADO DE (DAUM MACHADO, 2002).....	29
FIGURA 2. MATERIAL DIAMAGNÉTICO SOMETIDO A UN CAMPO EXTERNO. EN LA IMAGEN DE LA IZQUIERDA LOS DIPOLOS SE ENCUENTRAN EN SU ESTADO NATURAL MIENTRAS QUE EN LA IMAGEN DE LA DERECHA CADA DIPOLO SE HA ORIENTADO EN SENTIDO OPUESTO AL CAMPO. AUTORÍA PROPIA	29
FIGURA 3. CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA PARA UN ÁTOMO DE HIERRO. EL ORBITAL 3D SE ENCUENTRA SEMILLENTO, YA QUE HAY SEIS ELECTRONES EN ESTE NIVEL. AUTORÍA PROPIA.....	31
FIGURA 4. COMPORTAMIENTO DE LOS DOMINIOS MAGNÉTICOS AL APLICAR UN CAMPO EXTERNO EN UNA DIRECCIÓN DETERMINADA. AUTORÍA PROPIA.....	42
FIGURA 5. BANDAS DE ENERGÍA DE LOS DIFERENTES TIPOS DE MATERIAL. AUTORÍA PROPIA.....	44
FIGURA 6. CRISTAL TETRAGONAL. A LA IZQUIERDA SE MUESTRA QUE $a_1=a_2 \neq a_3$, ES DECIR DOS LADOS SON IGUALES EN LONGITUD. A LA DERECHA $a=b=c=90^\circ$, ASÍ LOS ÁNGULOS EN UN CRISTAL TETRAGONAL SON IGUALES. AUTORÍA PROPIA.....	47
FIGURA 7. CELDA PRIMITIVA DEL COMPUESTO $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ VISTA DESDE DIFERENTES ORIENTACIONES. TOMADA DE (RYAN, 1993)	48
FIGURA 8. DIFRACCIÓN DE ONDA, A TRAVÉS DE DOS OBSTÁCULOS (MURO). AUTORÍA PROPIA.....	49
FIGURA 9. DIAGRAMA DE LA LEY DE BRAGG DENTRO DE UNA RED CRISTALINA. AUTORÍA PROPIA.....	50
FIGURA 10. UNO DE LOS ÍNDICES DE MILLER PARA UNA RED TETRAGONAL. AUTORÍA PROPIA.....	52
FIGURA 11. ANISOTROPÍA UNIAxIAL DE UN CRISTAL TETRAGONAL. AUTORÍA PROPIA	55

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
Anexo A. Demostración de la función de Brillouin	67
Anexo B. Demostración Temperatura de Curie	72

INTRODUCCIÓN

Poder explicarse el entorno y los fenómenos que en este se presentan ha sido una tarea ardua para la humanidad, uno de los campos de especial foco es el estudio de los fenómenos magnéticos y puntualmente los asociados a los imanes permanentes, los cuales son componentes fundamentales en una amplia gama de aplicaciones tecnológicas que impactan significativamente nuestra vida cotidiana, desde dispositivos electrónicos hasta aplicaciones industriales. Estos imanes desempeñan un papel crucial debido a sus propiedades magnéticas únicas y su capacidad para mantener un campo magnético estable sin la necesidad de una fuente externa de energía.

Este trabajo se encuentra dividido en cinco capítulos, con el fin de evidenciar la relación que existe entre los electrones del orbital 4f y la magnetización en el compuesto determinado para este trabajo. En el capítulo 1 se comienza dando el contexto problema que inspiró la realización de esta investigación, seguido de los objetivos propuestos. Luego, en el capítulo 2, se hace una breve introducción histórica sobre las primeras nociones del concepto de imán permanente; en los capítulos 3 y 4 se encontrará el análisis energético en los materiales ferromagnéticos o imanes permanentes, desde el punto de vista de las curvas de histéresis del material y de la estructura misma del cristal, encontrándose la relación entre la disposición de los átomos de la red y la banda 4f.

Finalmente, se presenta un recuento de algunos instrumentos que han sido implementados en la actualidad gracias al descubrimiento de los imanes permanentes, para luego focalizarse en uno solo donde se emplea los imanes de neodimio, posterior a ello se termina el trabajo de grado con las conclusiones y bibliografía.

1. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN

1.1. CONTEXTO PROBLEMA

La física contemporánea, emerge a partir del avance de la ciencia y la tecnología del siglo XX, permitiéndose ver la naturaleza desde una nueva perspectiva, la cual está fundamentada en la comprensión de la relación entre masa y energía, la dualidad onda corpúsculo, la noción de partículas elementales, la idea de indeterminación, entre otras. Con el surgimiento de nuevas teorías como la relatividad, la mecánica cuántica o la mecánica estadística fue necesario, para la enseñanza de la física, añadir en el currículo de educación universitaria asignaturas donde se aborden estos temas (Gil, Senent, & Solbes, 1986).

Con el renacer de la ciencia en el siglo XX, la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales se negaba a acoger las nuevas teorías, esto significó un atraso en investigación e implementación en los campos de las diferentes áreas del conocimiento. Sin embargo, en 1923, Darío Rozo publicó un artículo donde refleja conceptos de la teoría general y especial de la relatividad dando paso a la aceptación, por parte de la Academia Colombiana de Ciencias de estas teorías, lo que generó una transformación de los currículos en las instituciones universitarias colombianas, aun así, se deja de lado la explicación en torno a los conceptos que gracias a la física contemporánea han permitido progresos a nivel tecnológico y por ende en la sociedad (Martinez-Chavanz, 2004).

Antes de la década de los 80, las ciencias se enseñaban con el fin de adquirir conocimiento mediante teorías, conceptos y procesos científicos, pero para la década de los 80 y 90 las nociones respecto a la enseñanza de las ciencias fueron cambiando a medida que el mundo avanzó. En la actualidad existen muchos países que han decidido implementar en sus currículos de educación básica tópicos dónde se dan a conocer las ciencias desde un enfoque social, con el fin de

formar estudiantes capaces de enfrentarse a las nuevas exigencias del mundo, mediante desarrollos tecnológicos y científicos, como consecuencia de ello, la alfabetización científica para todos se ha empezado a convertir en una prioridad, o en palabras de National Science Education Standards *“En un mundo repleto de productos de la indagación científica, la alfabetización científica se ha convertido en una necesidad para todos”* (Vilches & Furió, 1999); y es allí donde el rol del docente cumple un papel fundamental ya que es el encargado de instruir a sus alumnos en este ámbito, en otras palabras, está en las manos del docente promover la formación CTS (Ciencia, Tecnología y Sociedad) en sus estudiantes; en ese orden de ideas con el trabajo de grado se espera que los maestros en formación en física de la Universidad Pedagógica Nacional (UPN) logren acercarse a la comprensión del fenómeno de magnetización permanente a partir del estudio de la estructura del material $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ y cómo se relaciona con los avances tecnológicos.

Como maestros en formación entender la importancia de la enseñanza de las ciencias a partir de un enfoque CTS permite, además de proveer las herramientas necesarias al estudiante para enfrentarse al mundo que lo rodea (particularmente aquello que implica el uso de la tecnología), fortalecer las relaciones existentes entre las ciencias, la tecnología y su vínculo con la sociedad, promoviendo la alfabetización científica e impulsando el estudio de las ciencias.

Si bien un maestro tiene el deber de enseñar contenidos propios de la disciplina, también debe ser consciente de cómo puede relacionar lo que enseña con la vorágine tecnológica alrededor de sus alumnos, pues no se puede ser ajeno al contexto social en el que se desarrolla el estudiante, sino debe ser un motivo para que se tomen aquellas curiosidades del joven universitario sobre el funcionamiento del mundo tecnológico y se transforme en conocimiento interdisciplinar que enriquezca el crecimiento lógico y social del estudiante, recordando las palabras que Einstein dirigió a un grupo de estudiantes:

“Nunca toméis el estudio como una obligación, sino como una maravillosa oportunidad de aprender. Si aprovecháis esta oportunidad, experimentaréis una gran alegría personal, no comparable a ninguna otra de tipo material. Además, con ello beneficiareis a la sociedad, la que pertenece a vuestro trabajo futuro” (Aguilar Peris, 2002).

Esto refiere a que está en manos del estudiante tomar partida en la elaboración y construcción de los conceptos que lo acercarán a la comprensión de un mundo tecnológico en continuo desarrollo, sin embargo, es el maestro quien le provee las herramientas necesarias para que el estudiante pueda enfrentarse e involucrarse con su alrededor. Esto implica que se adapten los currículos de forma que las ciencias fisicoquímicas sean enseñadas como un conjunto y no de forma separada.

Es conocido que la enseñanza de las ciencias, enfocada particularmente en la física y la química, presenta en las aulas una aparente desvinculación, ya que al hacer una revisión de los currículos en educación media, es evidente notar que estas dos grandes ramas de la ciencia se abordan independientemente y de manera desligada (Ministerio de Educación Nacional (MEN), 2006), además, en el plan de estudios de la licenciatura en física de la UPN, en el ciclo de profundización no se presenta una asignatura donde se pueda evidenciar esta relación, no obstante, si se hace un recuento histórico de los últimos 200 años sobre aquellos científicos destacados es posible notar el crecimiento de estas dos disciplinas de manera conjunta, tal es el caso de: Humpry Davy, uno de los fundadores de la electroquímica y mentor de Michael Faraday, quien es reconocido como padre de la electrólisis, la inducción electromagnética y el diamagnetismo (Wayback Machine, 2017) ; Arnold Sommerfeld, también conocido como “el maestro” (Eckert, 2013), realizó grandes contribuciones en la formalización matemática de la difracción y realizó un ajuste al modelo atómico de

Niels Bohr. Por otro lado, pero no menos importante está Enrico Fermi, distinguido por sus aportes en física cuántica, física nuclear, física de partículas y física estadística, en esta última junto con Dirac, propusieron una distribución para determinar cuántas partículas se hallaban en un determinado nivel de energía en función de la temperatura y el potencial químico (Nobel Prize, 2022). Estos son algunos ejemplos que ponen en evidencia la relación antes mencionada, sin embargo, existen muchos más autores que han contribuido en este crecimiento; así se pone de presente la relación que ha existido entre físicos, químicos y matemáticos (Aguilar Peris, 2002) por lo que resulta beneficioso abordar algunos fenómenos naturales desde una perspectiva interdisciplinar, en especial teniendo como base la física y la química.

Es importante resaltar que las ciencias fisicoquímicas junto con la tecnología son complementarias entre sí, por ejemplo, el descubrimiento del electrón, la teoría cuántica, el tubo de rayos catódicos y el modelo atómico de Bohr. Este último introdujo el raciocinio necesario para consolidar el concepto de nube de probabilidad electrónica como una propiedad de los átomos, lo cual permitió desarrollar las bases de la química moderna (Aguilar Peris, 2002) contribuyendo en mejoras a nivel tecnológico e industrial, como por ejemplo las vacunas de ARN (ácido ribonucleico) utilizadas en los últimos meses contra el COVID-19 (Zschimmer & Schwarz España, 2022); permitiendo visualizar la estrecha relación entre la física y la química, lo cual ha desencadenado un bienestar general para la sociedad.

Por otra parte, y centrando la atención en los objetivos, los cuales se presentarán más adelante, y que se reflejan en el título del presente documento, el principal propósito del trabajo de grado se enfoca en la comprensión del fenómeno de magnetización permanente y su relación con la estructura interna del compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Por tal razón, se hace importante analizar de donde surge el concepto de imán.

Se conoce que los griegos fueron los primeros en considerar las propiedades de la magnetita, el cual es un mineral que posee un gran poder de atracción, pero fue Tales de Mileto quien por primera vez habla de forma detallada que es un imán (Tagüeña & Martina, 1986). No obstante, debido al gran interés por comprender la naturaleza y caracterizarla, Lucrecio Caro en su obra *De Rerum Natura* (55 a.C) describe las propiedades de la magnetita, según la traducción de Agustín García (Calvo, 1984) los imanes para Lucrecio son elementos que “*exhalan*” las partículas a través de los poros del hierro y que, al crearse el vacío, hacen que el hierro se sienta atraído (Tagüeña & Martina, 1986), además de esta descripción también define como sucede la repulsión. Aun así, con el gran poder especulativo de Caro, sus hipótesis y posibles explicaciones, no fueron tomadas en cuenta sino hasta 1600 cuando William Gilbert de Colchester (1544-1603), considerado el padre del magnetismo, en su obra *De Magnet* nombra la repulsión y atracción que presenta la magnetita, enuncia la existencia de los imanes permanentes y determina tres formas distintas de crear imanes. Después de esta obra, diversos científicos o más conocidos como *filósofos naturales*, se dedicaron a explicar las propiedades de la magnetita, entre otros aportes a la ciencia. Uno de ellos fue René Descartes, que en sus *Principia* determina la existencia de los imanes permanentes gracias al ferromagnetismo producto del magnetismo de la Tierra (Tagüeña & Martina, 1986). Así, desde Lucrecio hasta Maxwell se ha buscado aportar en la comprensión de aquella propiedad que los griegos, en la antigüedad, visualizaron y aprovecharon.

Ahora bien, al hacer una revisión de los contenidos programáticos de los cursos de Electromagnetismo II y de los cursos avanzados del programa Licenciatura en Física de la UPN la idea de campo magnético se aborda desde las ecuaciones de Maxwell como una consecuencia de las cargas eléctricas en movimiento, sin embargo, al momento de enseñar los fenómenos relacionados con el campo magnético producidos por un imán, se omite por completo el concepto de imán

permanente y asimismo las propiedades del material que lo dotan de dichas características magnéticas, lo que dista de las nociones previas a Maxwell y las explicaciones del porqué algunos materiales presentan esta persistencia en presencia del campo magnético, que va en contravía de lo que los científicos de la época buscaban explicar.

Es de denotar que actualmente la tecnología que está al alcance de la sociedad avanza a pasos agigantados, generando que la comprensión de lo que sucede en el interior de los dispositivos electrónicos de punta, tal es el caso de los Smartphones, sea totalmente incomprensible para el consumidor. Además de los imanes permanentes, gran parte de los dispositivos como: las pantallas de TV, equipos de sonido, lámparas fluorescentes, automóviles, pilas de combustible, catalizadores, etc. (Saéz Puche, Cascales , Porcher, & Maestro, 2000) que se encuentran en las manos de los usuarios tienen componentes y microcomponentes que están fabricados a base de lantánidos¹, o comúnmente conocidos en la literatura como “*tierras raras*” que gracias a sus características particulares han logrado introducirse en avances a nivel tecnológico e industrial; por esta razón han sido los elementos más estudiados en el último siglo, debido a su participación en herramientas que se utilizan en la vida cotidiana.

Cómo se mencionó, los imanes permanentes son materiales que poseen algún elemento de los lantánidos en su composición, permitiéndole tener características como la coercitividad o la remanencia magnética (que serán explicadas más adelante) que con su aplicación han logrado avances tecnológicos e industriales para la sociedad. Existen 4 tipos de imanes permanentes: imán de neodimio, ferrita, samario y de alnico. Particularmente se enfocará el trabajo de grado a los imanes de neodimio ya que son comúnmente usados en tecnología.

¹ Lantánidos. Elementos del sexto periodo de la tabla periódica.

Los imanes de neodimio son conocidos como imanes potentes debido a que presentan alta coercitividad magnética, la cual mide la capacidad que posee un material ferromagnético de ser desimantado, y remanencia magnética, que es la capacidad de un material de mantener el magnetismo luego de ser retirado el campo magnético externo inducido, éstas propiedades se obtienen luego de dopar el Neodimio (Nd) con Hierro (Fe) y Boro (B), además, gracias al dopaje es posible reordenar los electrones tal que el orbital quede vacío, semilleno o lleno. Estos imanes tienen la suficiente resistencia a la corrosión por lo que hace posible su uso en tecnología e industria, como, por ejemplo, motores eléctricos, turbinas eólicas, discos duros, altavoces, sensores, escáneres de resonancia magnética, generadores, auriculares, entre otros. Debido a las propiedades magnéticas de estos imanes el trabajo de grado se encaminó en su revisión, para abordar el fenómeno de magnetización permanente, mediante la cristalografía y la teoría de bandas, sin embargo, se trabajó con el compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ puesto que presenta el valor de remanencia magnética más alto conseguido hasta ahora, lo cual es una ventaja ya que permite que se produzcan imanes de pequeña dimensión, además si se realiza el producto de la remanencia con la coercitividad magnética se obtiene la capacidad del imán de almacenar energía, si la remanencia es la más alta conseguida permite que el material sea más eficiente para su uso a nivel tecnológico e industrial.

De acuerdo a lo anterior, la enseñanza de las ciencias, entiéndase ciencias en este contexto como físico-químicas, resulta eficaz cuando el estudiante encuentra sentido a lo que le ha sido explicado, pues el conocimiento puede conservarse cuando es posible relacionarlo con situaciones y elementos cotidianos (UNESCO, 2005). Si el maestro logra hacer una perfecta vinculación de la ciencia, la tecnología y su repercusión en la sociedad estaría proporcionando las herramientas necesarias para que el estudiante logre conectar su alrededor tecnológico con lo que le ha sido enseñado, además de ser una alternativa para las personas interesadas en comprender los contextos científicos que los rodean.

Por tales razones y con el fin de aproximar al estudiante de pregrado (de la UPN) a las características magnéticas propias de los imanes permanentes de neodimio y de su composición se plantea la siguiente pregunta problema:

¿Cómo a partir del comportamiento de los electrones en el orbital 4f en lantánidos, se puede generar una aproximación a la comprensión del fenómeno de la magnetización permanente?

1.2. OBJETIVOS

1.2.1. OBJETIVO GENERAL

- Evidenciar la relación existente entre los electrones del nivel 4f con el fenómeno de magnetización permanente en el compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.

1.2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar cómo la formación de bandas repercute en el comportamiento de las curvas de histéresis en el compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.
- Analizar la estructura del compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ con el fin de determinar cómo es la disposición de los electrones en la red y cómo dicha distribución influye en el fenómeno de magnetización permanente.
- Verificar cómo el comportamiento de los electrones en el orbital 4f ha repercutido en los avances tecnológicos actuales.

1.3. ANTECEDENTES

Con base en lo anterior y con el fin de cubrir los aspectos mencionados, se muestran los antecedentes principales que ayudaron en la realización del trabajo de grado, los cuales serán enunciados a continuación:

Caracterización magnética y estructural de nanopartículas de Nd₂Fe₁₄B sintetizadas con micropartículas de Fe₉₃Si₇/ Echeverry, C. / Universidad del Valle/ Valle del Cauca-Cali/ 2018: Este trabajo de grado contribuyó, ya que exhibe el marco teórico fundamental para la comprensión de las características propias (coercitividad y remanencia magnética) de los imanes permanentes.

Estudio de propiedades estructurales y magnéticas de aleaciones de tierras raras y metales de transición del sistema Gd_{0.257-x}Tb_xFe_{0.743}/ Galvis, M./Universidad del Tolima/ Ibagué-Tolima/ 2017: Este trabajo de grado ayudó en la investigación debido a que realiza un análisis del magnetismo en las tierras raras y explica los ciclos de histéresis en materiales magnéticos duros y blandos.

Relationships Between Crystal Structure and Magnetic Properties in Nd₂Fe₁₄B/ Jan F. Herbst, John J. Croat, and Frederick E. Pinkerton/ University of Missouri/ Columbia, Missouri/ 1984: Este artículo fue considerado para el trabajo de grado puesto que introduce la estructura cristalina del compuesto Nd₂Fe₁₄B y asocia las características magnéticas que son deducibles a partir del ordenamiento de los átomos en la red cristalina.

2. BREVE HISTORIA DE LOS IMANES PERMANENTES

A través del paso del tiempo, los seres humanos se han preocupado por explicar las características de los materiales para su uso y beneficio diario, como la forma, el color, el comportamiento, entre otros; generando una clasificación basada en sus propiedades, entre ellos las relacionadas con magnetismo. El magnetismo es un fenómeno natural que el humano ha estudiado y conocido desde hace miles de años, pues a lo largo de la historia ha avanzado hasta lo que hoy se utiliza en la industria y tecnología.

Cerca del 800 a.C, los griegos se habían topado con una roca de características que no habían observado antes, puntualmente cerca de Magnesia, una ciudad al norte del mar Egeo. Según la leyenda, un pastor llamado Magnes, fue quien descubrió las propiedades de esta piedra luego de caminar sobre ella con zapatos de tachuelas de hierro, percibiendo que éstas se pegaban al suelo, notando que dicha piedra tenía la capacidad de atraer pequeños trozos de hierro (Lopez, s.f); gracias a este descubrimiento la roca ígnea tomo el nombre de Magnetita y el fenómeno causado por esta, magnetismo.

Posterior al descubrimiento griego, Pedro de Maricourt escribió en 1269, una carta donde se registran algunos experimentos con el fin de ayudar a los navegantes de la época, baja edad media, a seleccionar y utilizar la magnetita de forma en la que se puedan aprovechar sus propiedades. En esta carta, entre otros aspectos, exhibe como deducir los polos de la roca, muestra que, a pesar de ser fragmentada, estos nuevos trozos poseen los mismos polos de la roca inicial (dipolos magnéticos) y plantea un método para encontrar la imanación del hierro, como se ve en el fragmento:

Es sabido por todos los expertos que cuando un hierro oblongo tocado por un imán y fijado sobre un pedazo de madera ligera o sobre un tallo es colocado sobre el agua, una de sus partes se moverá hacia la estrella llamada náutica, y ello porque [ésta] se encuentra próxima al polo; pero la verdad es que [el imán] no se mueve hacia la mencionada estrella sino hacia el polo [de la Tierra]...

...En lo que respecta a determinar qué parte del hierro gira hacia qué parte del cielo debes saber que la parte del hierro que ha tocado la parte sur de la piedra se girará hacia la parte norte del cielo. Y viceversa, en efecto, la parte del hierro que ha tocado la parte norte de la piedra se girará hacia la parte sur del cielo; y la causa del movimiento del hierro es una cosa asombrosa que no se comprende; pero la experiencia [que hemos realizado] nos ha probado que lo dicho es cierto. (Minecan, 2017)

Es importante resaltar que la obra de Maricourt fue escrita con la intención de ser usada como un manual experimental o un recetario, es decir donde el lector fuera quien decidiese realizar las conclusiones, así, quien verdaderamente confirmaba lo escrito en la carta era quien ejecutaba dicha receta y construía un fundamento teórico alrededor del mismo. Sin embargo, es destacable la implicación de la Tierra a lo largo de la carta, pues en el fragmento anterior se evidencia como se explica la deflexión del hierro debido a la influencia del polo terrestre, si bien no se hace a detalle, pone de presente los primeros pensamientos respecto a que el mundo terrestre se comporta como una “magnetita gigante”, lo cual sería estudiado con mayor detalle alrededor del siglo XVI.

William Gilbert, médico y físico inglés, a raíz de la poca investigación alrededor del magnetismo e influenciado por el manual experimental de Maricourt decidió en 1600 publicar su obra maestra “De Magnete”, considerada uno de los textos más importantes en la historia de esta área de estudio, pues sentó las bases para futuros desarrollos en este campo del conocimiento. El libro se divide en seis

capítulos donde presenta observaciones y experimentos sobre el magnetismo, los imanes y las propiedades magnéticas de la Tierra. Puntualmente afirma que la “*Tierra misma es un imán gigante*” (Mottelay, 1893) pero con el “poder” de mantener la magnetización en ella, pues había estudiado la capacidad de los imanes para adquirir y retener su magnetismo; también realizó las primeras investigaciones sobre los materiales (hoy llamados ferromagnéticos) a partir de la magnetización de un trozo de hierro, pues se tenían evidencias de que podía comportarse como un imán.

Entre las observaciones relacionadas con los materiales ferromagnéticos encontrados por Gilbert se pueden destacar algunas de las características que hoy en día son fundamentales para considerar un imán permanente², las cuales son:

- Magnetización duradera: Observó que algunos materiales, como el hierro, podían ser magnetizados de manera permanente (lo que más adelante se llamó alnico), es decir, podían retener sus características magnéticas incluso después de que se retirara el campo magnético externo, el cual los había magnetizado en primer lugar.
- Polos magnéticos: Notó que estos materiales, luego de su magnetización, tenían las propiedades de la magnetita, es decir que poseían un polo norte y un polo sur magnéticos.
- Atracción y repulsión: Exploró cómo los materiales ferromagnéticos interactuaban entre sí y con otros imanes. Descubrió que, al igual que los imanes naturales o aceros magnéticos, los materiales ferromagnéticos podían atraer o repeler otros objetos magnéticos según la orientación de sus polos.

² Se define como un material que puede ser imantado, el cual es capaz de generar un campo magnético permanente luego de haberse quitado el campo magnético externo.

- Anisotropía magnética: Determinó que los materiales ferromagnéticos tenían una estructura interna, la cual influía en su comportamiento, hay que recordar que, para los filósofos naturales del siglo XVI, predominaban las ideas materialistas puntualmente la noción de corpúsculo. Donde los materiales estaban constituidos de dichos corpúsculos en su interior y generaban una estructura determinada la que producía una dirección preferencial de magnetización en el material, esto, hoy en día se conoce como anisotropía magnética.
- Imanes temporales: Gilbert descubrió que algunos materiales ferromagnéticos que inicialmente no se encontraban magnetizados, podían convertirse en imanes temporalmente. Cuando se exponían a un campo magnético externo, podían adquirir magnetismo, pero este magnetismo podía desaparecer con el tiempo o cuando se eliminara la fuente del campo magnético.

En conjunto, las investigaciones de William Gilbert sobre los materiales ferromagnéticos contribuyeron significativamente a la comprensión temprana del magnetismo y sentaron las bases para futuros avances en este campo del conocimiento y la física de materiales. Su trabajo fue fundamental para la formación de las teorías modernas sobre cómo los materiales ferromagnéticos adquieren y retienen su magnetismo.

Tiempo después, durante la Revolución Industrial en el siglo XIX, se realizaron avances en la fabricación de imanes permanentes debido al descubrimiento de nuevos materiales, sin embargo, en este punto ya existían dos tipos de imanes fuertemente utilizados, los aceros magnéticos y los alnicos (acrónimo de aluminio, níquel y cobalto).

Los aceros magnéticos o piedra magnetita fueron utilizados hasta mediados del siglo XIX, pues al tener presencia de carbono (C) y hierro (Fe) en su composición aseguraba su resistencia posibilitando su implementación en las brújulas de la época; después de la primera guerra mundial dejaron de utilizarse en su totalidad y fueron reemplazados por los alnicos (Pérez Alcazar, 2016).

En la década de 1930, la búsqueda de mejores imanes, más potentes y con amplio espectro de aplicaciones, permitió descubrir los alnicos, un tipo de imanes permanentes principalmente compuestos de aleaciones de aluminio, níquel y cobalto, añadiendo hierro, cobre y titanio, conocidos por su fuerza magnética y su capacidad para mantener su magnetismo en condiciones adversas. Han sido ampliamente utilizados en diversas aplicaciones, como altavoces, micrófonos, generadores, motores eléctricos, sensores, instrumentos científicos, entre otras; su capacidad para funcionar a altas temperaturas y su estabilidad magnética los hacen útiles en entornos exigentes. Aunque estos imanes han sido reemplazados (desde 1967) en muchas aplicaciones por imanes de tierras raras³, todavía se utilizan en áreas donde se necesitan propiedades específicas de resistencia térmica y estabilidad magnética (Saéz Puche, Cascales , Porcher, & Maestro, 2000).

Como se mencionó, el mérito por encontrar imanes cada vez mejores provocó el descubrimiento de nuevos materiales con los que el hombre no se había atrevido a trabajar o siquiera indagar, entre ellos están los elaborados a partir de tierras raras o lantánidos.

Los lantánidos son elementos pertenecientes al sexto periodo de la tabla periódica. La obtención de estos elementos fue de complejidad en la comunidad

³ Las tierras raras son un conjunto de 17 elementos [Lantano (La), Cerio (Ce), Praseodimio (Pr), Neodimio (Nd), Prometio (Pm), Samario (Sm), Europio (Eu), Gadolinio (Gd), Terbio (Tb), Disproso (Dy), Holmio (Ho), Erblio (Er), Tulio (Tm), Iterbio (Yb), Lutecio (Lu), Escandio (Sc) e Itrio (Y)] pertenecientes al sexto periodo de la tabla periódica, también reciben el nombre de lantánidos.

científica puesto que se encontraban presentes en ciertos minerales junto con otros metales de transición, lo que retrasó su descubrimiento, pues en 1794 es cuando Gadolin descubre el itrio en Ytterby (Suecia) y no es sino hasta 1963 con el descubrimiento del último elemento del grupo (Prometio) que se empiezan las primeras aplicaciones de las tierras raras en magnetismo, óptica, pigmentos, teléfonos celulares, entre otros. De estas aplicaciones cabe destacar la preparación de imanes permanentes compuestos de tierras raras los cuales poseen un carácter ferromagnético, temperaturas de Curie⁴ por debajo de la temperatura ambiente y anisotropía magnética. Cuando se dopan estos elementos con metales de transición como el hierro, cobalto o níquel proporcionan compuestos con mayor anisotropía, debido a la configuración electrónica propia de la tierra rara (Saéz Puche, Cascales , Porcher, & Maestro, 2000).

El primer imán permanente de este tipo fue el YCo₅ descubierto en 1966, lo que produjo la miniaturización de los dispositivos utilizados en la cotidianidad como los audífonos y motores, aunque sus aplicaciones tecnológicas eran prometedoras su obtención resultaba costosa debido al alto precio del Cobalto en los años ochenta, por lo que la industria tuvo que verse en la obligación de buscar una alternativa mucho más económica. En 1984, General Motors (USA) y Sumitomo (Japón) construyeron paralelamente un imán a base de Neodimio, el cual era mucho más barato, liviano y con mejores capacidades en comparación con el YCo₅. Así, se tiene como ejemplo el campo de aplicación de los imanes de Neodimio, su uso en la electrónica para discos duros, altavoces grandes y pequeños auriculares (Saéz Puche, Cascales , Porcher, & Maestro, 2000).

En la época actual, el magnetismo continúa siendo un tema de investigación crucial en el ámbito de la física y la ingeniería, con aplicaciones que abarcan una

⁴ Temperatura límite en la cual un cuerpo ferromagnético pierde su magnetismo, cambiando su configuración a un material paramagnético.

diversidad de campos de estudio. La historia de los imanes permanentes consiste en una fascinante amalgama de observaciones ancestrales, logros científicos y aplicaciones pragmáticas desarrolladas a lo largo de los siglos. Su influencia en la tecnología contemporánea es innegable, pues desempeñan un papel fundamental en una amplia gama de dispositivos, con propiedades singulares, y sistemas que son parte integral de nuestra vida cotidiana.

Lo anterior muestra un panorama general de cómo ha sido la historia, evolución y aplicación de los imanes permanentes, sin embargo, el propósito de este trabajo no es realizar una revisión histórica del descubrimiento y evolución de los imanes sino más bien hacer una comparación sobre el comportamiento magnético de estos, puntualmente del compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ por lo que los siguientes capítulos responderán a cada objetivo propuesto en esta investigación.

3. MAGNETIZACIÓN PERMANENTE

Continuando con los objetivos del trabajo, en el presente capítulo se aborda cómo el comportamiento magnético del compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ se puede explicar desde el carácter energético del mismo, debido a que da cuenta de la formación de los dominios que, posteriormente, se relacionan con las curvas de histéresis del material ferromagnético planteado.

3.1. MATERIALES FERROMAGNÉTICOS, CONDICIONES ENERGÉTICAS Y MAGNETIZACIÓN

Como se mencionó en el capítulo anterior, el magnetismo es una propiedad de la materia que se manifiesta a través de la atracción o repulsión entre ciertos tipos de materiales. Las primeras nociones del fenómeno magnético se dieron aproximadamente hacia el siglo V a.C. luego de identificar las características provenientes de la magnetita, una piedra natural que tiene propiedades magnéticas. Con este descubrimiento, la vorágine investigativa acerca de este fenómeno creció a tal punto de ser utilizada en diversas ramas como: ingeniería, medicina, electrónica, entre otros; esto ha permitido encontrar materiales con los que se busca potenciar dichas características magnéticas.

Los materiales magnéticos son aquellos que luego de ser magnetizados se comportan como imanes. Cuando se aplica un campo magnético externo, los materiales se iman por dos contribuciones a nivel atómico, la primera debida al movimiento del electrón alrededor del núcleo (según el modelo de Bohr) como se muestra en la figura 1, el cual genera un comportamiento diamagnético en el material, es decir una magnetización que se opone al campo magnético externo.

Es de resaltar que la mayoría de los materiales, por no decir todos, tienen un comportamiento diamagnético, sin embargo, su intensidad a temperatura ambiente es bastante débil comparada con otros comportamientos magnéticos tales como el paramagnetismo⁵ y el ferromagnetismo⁶ los cuales se originan por la segunda contribución atómica, que es debida al **espín**⁷ del electrón.

Partiendo de la contribución dada por el movimiento orbital del electrón alrededor del núcleo y teniendo en cuenta que se está trabajando con un modelo semi-cuántico, es posible considerar la trayectoria como una órbita circular, la cual es equivalente al desplazamiento del electrón al interior de una espira circular de algún material conductor, por ende existe también una corriente que va en contra del movimiento del electrón, ya que, por definición la corriente es el desplazamiento de las cargas positivas o de los huecos que deja el electrón al moverse, por ejemplo, si el electrón va en sentido antihorario, la corriente tendrá un sentido horario y esta corriente, en consecuencia, genera un campo magnético inducido en el centro de dicha espira, tal como se puede apreciar en la figura 1 (Moebes, Ling, & Sanny, 2021). Debido a lo anterior, en el centro de esta espira imaginaria también se genera un **momento dipolar magnético orbital** [\vec{m}], quien es el responsable del surgimiento del campo magnético inducido, en otras palabras, el desplazamiento orbital del electrón se puede asumir como un dipolo magnético.

⁵Se caracteriza por la atracción débil de algunos materiales hacia un campo magnético externo. Cuando se exponen a un campo magnético, los electrones desapareados en los átomos o moléculas de un material paramagnético se alinean en la misma dirección que el campo. Esto crea un campo magnético inducido en el material, que es débil pero opuesto al campo externo.

⁶ Son aquellos que exhiben un comportamiento magnético característico, conocido como ferromagnetismo. En estos materiales, los momentos magnéticos se alinean en la misma dirección, lo que da lugar a un campo magnético neto diferente de cero.

⁷ El espín es una propiedad física de las partículas elementales que les confiere un momento angular intrínseco. El espín es una propiedad puramente cuántica, y no se puede relacionar de forma directa con una rotación en el espacio. El espín se representa mediante un número cuántico, que puede tomar los valores enteros o semienteros. El espín del electrón es 1/2, el del fotón es 1, el del bosón de Higgs es 0.

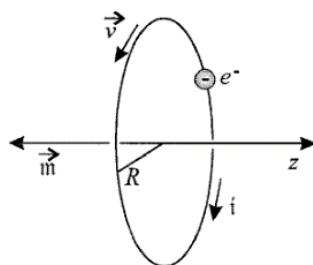


Figura 1. Movimiento orbital del electrón alrededor del núcleo según el modelo de Bohr. Tomado de (Daum Machado, 2002).

Naturalmente cada material tiene dipolos magnéticos en su estructura, sin embargo, cuando no hay campo en las proximidades del material estos se encuentran orientados de forma aleatoria, mientras que al aplicarse un campo externo la dirección de estos dipolos se configura en una posición determinada dependiendo del tipo de material que se trate. Al someter una muestra a un campo magnético externo uniforme $[\vec{B}]$ provoca un torque en cada dipolo, esto se debe a que sentirá atracción o repulsión hacia el campo, como si se tratase de la interacción entre dos imanes, magnetizando la muestra en su totalidad, como se muestra en la figura 2.

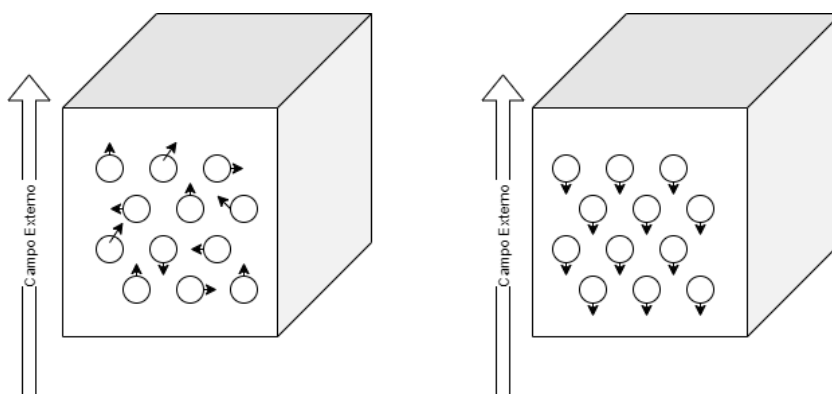


Figura 2. Material diamagnético sometido a un campo externo. En la imagen de la izquierda los dipolos se encuentran en su estado natural mientras que en la imagen de la derecha cada dipolo se ha orientado en sentido opuesto al campo. Autoría propia

Como se mencionó anteriormente, el momento magnético orbital explica el comportamiento diamagnético de los materiales, los cuales son aquellos que

tienen un campo magnético débil, que, al ser expuestos a un campo externo, sus dipolos magnéticos se orientan en sentido opuesto (Perafán Herrera, 2019).

Es de recordar que \vec{m} no es la única contribución que existe dentro del átomo cuando es sometido a una magnetización, además de poseer una carga eléctrica (característica intrínseca definida) el electrón también tiene un **momento dipolar magnético intrínseco**, el cual está relacionado con el **espín** de la siguiente manera:

$$\vec{m}_s = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (1)$$

Donde μ_B es una constante relacionada con el momento magnético de los electrones denominada magnetón de Bohr, que equivale a $9.2740 \times 10^{-34} \frac{J}{T}$, \vec{S} el espín de electrón y g es el factor de Landé, el cual es una constante de proporción adimensional que relaciona \vec{S} y \vec{m}_s da cuenta de cómo se desvían los momentos magnéticos de los electrones en presencia de un campo magnético externo; para el caso del electrón g vale -2 aproximadamente. La contribución de ambos momentos (magnético orbital y magnético intrínseco o momento magnético neto) establece la distinción en el comportamiento magnético en los materiales, para el caso puntual de \vec{m}_s explica el paramagnetismo y ferromagnetismo de los que se hablará más adelante.

Una característica particular del espín del electrón es su forma de organizarse, ya que buscan formar pares dentro de los orbitales atómicos, eso siguiendo el principio de exclusión de Pauli, el cual establece que dos electrones no pueden ocupar el mismo estado cuántico⁸, puntualmente para el caso del espín indica que

⁸ En física, un estado cuántico es la descripción del estado físico de un sistema cuántico. En la física clásica, los sistemas físicos pueden describirse por una serie de variables que determinan su estado, como la

no puede haber dos electrones en el mismo estado, up (+1/2) o down (-1/2); gráficamente este principio se puede encontrar en la tabla periódica como se muestra en la figura 3.

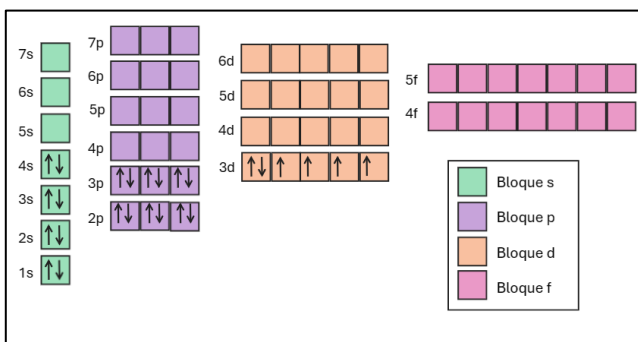


Figura 3. Configuración electrónica para un átomo de hierro. El orbital 3d se encuentra semilleno, ya que hay seis electrones en este nivel. Autoría propia.

Como se puede observar en la figura, existen casos en donde no hay un par de electrones apareados; esta característica permite que un material sea fuertemente magnetizado ya que, cuando se tiene un par de electrones ocupando el mismo subnivel energético (en la imagen el subnivel se representa por un cuadrado) el momento magnético neto entre ellos es cero, como en el nivel 1s, mientras que para un solo electrón será distinto de cero como en el segundo recuadro del nivel 3d.

Cuando a un material se le aplica un campo magnético externo, adquiere una energía potencial U asociada al torque, es de recordar que dicho torque se da cuando los momentos magnéticos orbitales se alinean debido a la presencia del campo externo, además, cabe aclarar que el torque es experimentado por cada dipolo magnético dentro del material. Por tal razón U está dada por la relación

posición, la velocidad, la energía, etc. Sin embargo, en la mecánica cuántica, estas variables no pueden ser determinadas con precisión absoluta. En cambio, los estados cuánticos están descritos por funciones de onda, que representan la probabilidad de encontrar el sistema en un estado particular.

Una de las características más importantes de los estados cuánticos es que pueden superponerse. Esto significa que un sistema cuántico puede estar en dos o más estados a la vez. Por ejemplo, un electrón puede estar en dos orbitales diferentes del átomo de hidrógeno al mismo tiempo.

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B} \quad (2)$$

La expresión anterior es el caso general para un material diamagnético. Como el interés es llegar a una expresión que muestre el comportamiento magnético en un material ferromagnético, así se describirá la energía potencial U en términos de \vec{m}_s ya que, como se mencionó, el momento intrínseco es el que proporciona la distinción en los materiales magnéticos. Por consiguiente, teniendo en cuenta la ecuación (1), para un material ferromagnético se tiene

$$U = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (3)$$

Generalmente suele utilizarse la definición de campo magnético asociado a la intensidad de campo (\mathbf{H}), el cual se define por

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$$

Donde μ_0 es la permeabilidad del vacío. Si se orienta el campo magnético en dirección z y se sustituye por la intensidad \mathbf{H} , la expresión 3 quedaría descrita para un material ferromagnético así

$$U_H = -\frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_z S_z$$

El subíndice z indica la dirección en la que se está aplicando el campo \mathbf{H} .

Al tratarse de una muestra con muchos átomos, se debe considerar la contribución de cada dipolo sobre el material. En la expresión anterior $-\frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_z$ permanece constante, por tal razón S_z es quién está indicando la contribución de cada

electrón al someter la muestra a un campo magnético externo. Como se tienen N electrones, existirá un aporte neto hacia la magnetización global de la muestra, esta será expresada por la sumatoria de cada espín en la orientación del campo H utilizado, tal que

$$U_H = -\frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H \sum_{i=1}^N S_{zi} \quad (4)$$

Como se ha mencionado, en los materiales magnéticos hay dos contribuciones atómicas que permiten la magnetización. Para una sustancia ferromagnética además de la interacción de los electrones desapareados en el material con el campo externo aplicado, internamente sucede una interacción entre cada par de electrones explicada a partir del modelo de Heisenberg. Este modelo describe el comportamiento magnético de un material sólido, considerando que los electrones tienen un momento magnético localizado en la red cristalina los cuales se acoplan formando una interacción de intercambio (J). Esta interacción J en esencia expresa la energía promedio necesaria para influenciar la orientación del momento magnético de los electrones circundantes (Coso, y otros, s.f.), ocurre que cada electrón tendrá un pequeño campo magnético que interactúa con los electrones a su alrededor, con el fin de orientarlos en una dirección determinada, así se desarrolla un efecto en cadena por cada electrón de la muestra hasta que finalmente se alcanza la magnetización total. Para expresar esta energía interna se considera la muestra con N electrones interactuando con el fin de orientarse todos en el mismo sentido, así

$$U_{int} = -J \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j>i}}^N S_{zi} S_{zj} \quad (5)$$

En la expresión anterior, S_{zi} es el electrón que está influenciando su alrededor y S_{zj} son los electrones más cercanos, es representado por una sumatoria porque se considera la interacción de N electrones en la muestra. Cabe resaltar que J , en el caso de los materiales ferromagnéticos, es un valor negativo dado que cada par de electrones se orientará en el mismo sentido del campo aplicado, manifestándose en el material (macroscópicamente) una magnetización neta, en otras palabras, un comportamiento de imán (Coso, y otros, s.f.).

Retomando que la magnetización total de la muestra está dada por dos contribuciones, la primera debida la presencia de un campo magnético externo aplicado sobre la muestra, ecuación (4) y la segunda debida a la interacción entre los espines de los electrones cercanos al interior de la muestra, ecuación (5). Por consiguiente, y teniendo en cuenta lo anterior, la energía total asociada a un material ferromagnético imanado queda

$$U_{total} = -\frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H \sum_{i=1}^N S_{zi} - J \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j>i}}^N S_{zi} S_{zj} \quad (6)$$

Lo anterior corresponde al modelo de Ising, básicamente este permite hallar la magnetización total en un material (Modelo de Ising, 2023) no obstante, este caso no posee una solución analítica para la energía total del sistema debido a la introducción de un campo magnético constante (primer término de la formulación (6)) por ello se debe reducir el problema utilizando métodos aproximados, para este caso se utiliza el modelo de Weiss, el cual se expone a continuación.

Primero se considera que S_{zi} solo influencia la orientación de n electrones vecinos, debido a que la interacción de cada electrón es de corto alcance, por tal razón la contribución de S_{zi} se puede asumir como constante según el modelo de Weiss, de modo que

$$U_{total} = -\frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H S_{zi} - S_{zi} J \sum_{i=1}^n S_{zj} \quad (7)$$

Con la consideración anterior, Weiss introdujo una equivalencia, dedujo que la expresión $J \sum_{i=1}^n S_{zj}$ en su totalidad, luego de ejecutar la sumatoria, puede ser expresada en función de un nuevo campo magnético H_m , el cual denominó campo molecular. Dicho campo se debe a la presencia de los momentos magnéticos intrínsecos de cada electrón, es decir, que cada electrón posee un pequeño campo magnético que influencia a sus vecinos más cercanos, haciendo que estos se empiecen a orientar en una dirección determinada, mientras más electrones continúan aportando a su intensidad conforme se alinean los unos debido a la interacción con los otros, H_m aumenta (Teoría del campo molecular, 2021); por lo que el segundo término de la ecuación anterior puede ser reescrito en términos del nuevo campo molecular así:

$$J \sum_{i=1}^n S_{zj} = \frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_m \quad (8)$$

Sustituyendo en el segundo término de la expresión anterior en (7), se obtiene

$$U_{total} = -\frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H S_{zi} - S_{zi} \frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_m$$

Factorizando y recordando que S_{zi} se encuentra cuantizado, es decir que $S = m\hbar$, donde m puede asumir los valores de $m = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$, a su vez S es el

espín del electrón, por tal razón tiene el valor de $\frac{1}{2}$, y \hbar es la constante de Planck reducida⁹,

$$U_{total} = -g\mu_0\mu_B m(H + H_m)$$

Esta expresión corresponde a la energía total asociada a un material ferromagnético, pues muestra la contribución del campo H y del campo H_m . Ahora reconociendo la energía presente en la muestra y recordando que se quiere llegar a la expresión de magnetización del material se hace uso de la siguiente expresión, obtenida a detalle en el anexo A (ec. A.14)

$$B_S(x) = \frac{k_B T}{nJS^2\hbar^2} \left(x - \frac{g\mu_0\mu_B SH}{k_B T} \right)$$

Donde $B_S(x)$ es la función de Brillouin (Función de Brillouin y aplicación de la ley de Curie-Weiss, 2010), la cual permite explicar el comportamiento magnético de los materiales al considerar el momento dipolar magnético intrínseco promedio de la muestra imanada, en este caso, x es el producto entre $g\beta\mu_0\mu_B(H + H_m)S$ y n son los primeros electrones vecinos en interacción. Para analizar a detalle que ocurre en la magnetización de un material se tiene en cuenta la temperatura de este, ya que la aparición de los dominios es posible gracias a temperaturas menores a la temperatura de Curie (T_c), la cual es la temperatura crítica de un material, cuando esta temperatura se supera se pierden las propiedades ferromagnéticas convirtiéndose en un material puramente paramagnético. Se puede escribir la función de Brillouin en términos de la temperatura de la muestra (anexo B), tal que

⁹ Con un valor definido por $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, donde h es $6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$

$$B_S(x) = \frac{1}{3} \frac{g\mu_0\mu_B S(S+1)}{k_B(T - T_c)} H \quad (9)$$

Donde k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura del material. La magnetización media en un material está dada por

$$\langle M_z \rangle = Ng\mu_B SB_S(x)$$

Allí $\langle M_z \rangle$ es el valor medio de la magnetización, este tiene un índice en z debido a que el campo aplicado coincide en esta dirección y N es el número de átomos de la muestra. Usando la expresión anterior y sustituyendo el valor de la ecuación (9), resulta

$$\langle M_z \rangle = \frac{1}{3} \frac{Ng^2\mu_0\mu_B^2 S(S+1)}{k_B(T - T_c)} H$$

La anterior expresión muestra la magnetización de un material ferromagnético, la cual está relacionado con la temperatura, cuando $T \gg T_c$ el denominador es muy grande haciendo que M_z sea pequeño, es decir que la magnetización del material se pierde a medida que la temperatura aumenta y supera la temperatura límite o de Curie.

Ahora cuando $T \rightarrow T_c$ la expresión anterior diverge, ya que el denominador tiende a cero y la magnetización se indetermina. Finalmente, si $T \rightarrow 0$, la parte inferior de la expresión se hace pequeña, a su vez la magnetización aumenta llegando a su valor máximo, donde $B_S(x) \approx 1$, tal como se explica en el anexo B,

$$\langle M_z \rangle = Ng\mu_B S$$

Esta expresión representa la magnetización de saturación de un material ferromagnético, el cual es el valor máximo del momento magnético intrínseco promedio a una temperatura $T \rightarrow 0$. Dicha magnetización se puede entender mejor al analizar la curva de histéresis de un material ferromagnético.

3.2. CURVAS DE HISTÉRESIS

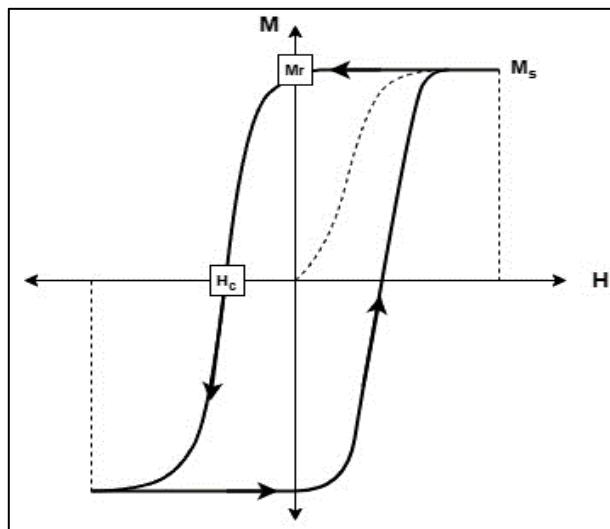
La magnetización de un material puede ser representada gráficamente mediante una curva cerrada, la cual muestra la evolución de la pieza imanada a nivel macroscópico al someterla a un campo magnético externo. La curva de histéresis magnética representa la relación entre la magnetización (M_z) de un material y el campo magnético aplicado (H), no obstante, el origen de esta curva es gracias a la interacción entre los dominios dentro del material (Del Hoyo, 2005) de los que se hablará más adelante.

La histéresis magnética tiene dos regiones (gráfica 1), la primera es la **región ascendente**, la cual inicia desde el origen y está representada por la curva punteada en la gráfica 1, en esta región, el campo magnético aplicado induce un aumento de la magnetización en la muestra. La magnetización alcanza un valor máximo, llamado magnetización de saturación (M_s). La segunda es la **región descendente**, en esta región, el campo magnético aplicado se reduce, pero la magnetización de la muestra no vuelve a cero. La magnetización remanente (M_r) es la que queda en la muestra cuando la intensidad del campo magnético aplicado se reduce a cero.

Para eliminar la magnetización remanente, es necesario aplicar un campo magnético en sentido contrario, llamado campo coercitivo (H_c). Nuevamente, al seguir aumentando la intensidad del campo magnético externo en esta nueva dirección, la magnetización volverá a saturar en un valor determinado ($-M_s$), acá el

negativo da cuenta de la dirección del campo magnético aplicado y por lo tanto de la dirección de magnetización del material, luego se disminuye la intensidad del campo hasta llegar a cero, aquí el campo se orienta en la dirección inicial y se aumenta hasta llegar nuevamente a la magnetización de saturación (M_s), cerrando la curva y completando el ciclo de histéresis.

Ahora, en el caso de los imanes permanentes, luego de completar el ciclo, internamente en el material la magnetización remanente es la protagonista, ya que gracias a ella el imán se mantiene magnetizado.



Gráfica 1. Partes de la curva de histéresis. Las curvas muestran una relación no lineal. Autoría propia

Estas características mencionadas son aquellas que han clasificado a los imanes de neodimio como los más fuertes del mercado en comparación con otros imanes de tierras raras (SmCo_5), como se muestra en la siguiente tabla:

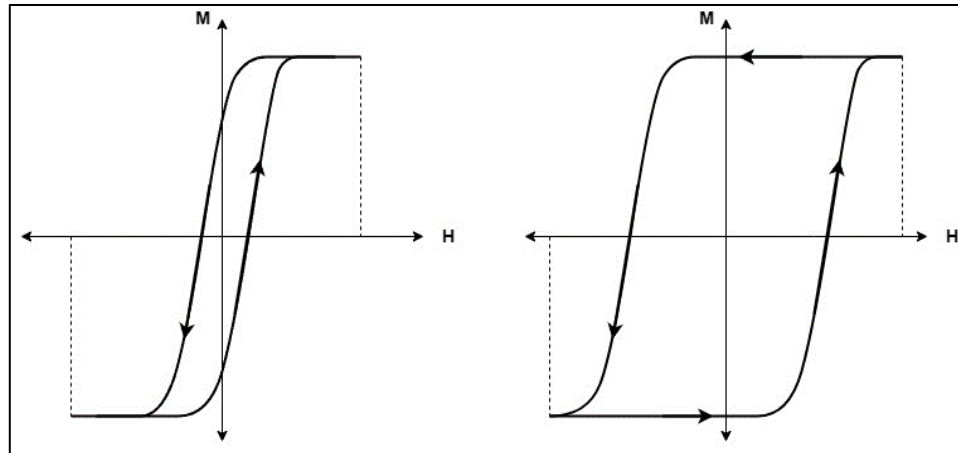
Propiedad	Nd ₂ Fe ₁₄ B	SmCo ₅
Magnetización Remanente (T)	1.0 - 1.4	0.8 - 1.1
Magnetización de Saturación (T)	1.6	1.3
Campo Coercitivo (kA/m)	750 - 2000	600 – 2000
Temperatura de Curie (°C)	310 - 400	720
BH _{max} (kJ/m ³)	200 - 440	120 – 200

Tabla 1. Comparación de las propiedades magnéticas características de dos tipos de imán permanente compuestos de tierras raras (Nd y Sm). Tomado de (Imán de neodimio, 2023)

Como se observa en la tabla la única desventaja de producir imanes de neodimio, además de la adquisición del material (Echeverry Naranjo, 2018), es la temperatura crítica, pues corresponde a un valor pequeño en comparación con los imanes de samario. Hay que aclarar que ambos imanes a pesar de ser de tierras raras no poseen las mismas propiedades magnéticas debido a que la cantidad de electrones desapareados en cada uno es diferente, y por tanto sus momentos magnéticos.

Uno de los ejemplos más comunes de histéresis es la curva en un material ferromagnético, como el hierro. Esta curva tiene una forma característica, lo que significa que la magnetización del material no sigue una relación lineal (como se aprecia en la gráfica 1) con el campo magnético aplicado.

El ciclo de histéresis permite clasificar los materiales según el comportamiento de este, tal que existen dos tipos de magnetización en los materiales ferromagnéticos, como se ve en la gráfica 2, el magnetismo duro (derecha) y el magnetismo blando (izquierda). Los materiales magnéticos duros tienen una alta magnetización remanente y un alto campo coercitivo. Estos materiales se utilizan en aplicaciones que requieren un fuerte campo magnético, como motores y generadores. Los materiales magnéticos blandos tienen una baja magnetización remanente y un bajo campo coercitivo. Estos materiales se utilizan en aplicaciones que requieren un campo magnético variable, como transformadores y relés.



Gráfica 2. Curvas de magnetización para materiales blandos (izq.) y materiales duros (der.). Autoría propia

Como se explicó más arriba, las curvas de histéresis exhiben una mirada macroscópica del material imantado como resultado del comportamiento de los dominios magnéticos. Según Del hoyo (2005), la existencia de los dominios se debe a que el sistema busca, naturalmente, el estado de mínima energía. Existen cuatro energías, en este trabajo solo se tratarán tres de ellas, que intervienen en la formación de los dominios. En esta sección se analizarán las dos primeras, que serán mencionadas a continuación y las cuales han sido abordadas con anterioridad:

- Energía interna (U_{int}): Esta es la energía necesaria para influenciar la orientación del momento magnético de los electrones más cercanos, cuando un conjunto de electrones se orienta paralelamente generan un dominio, el cual en sus fronteras es capaz de influenciar a los electrones circundantes provocando la magnetización total de la muestra (figura 4).

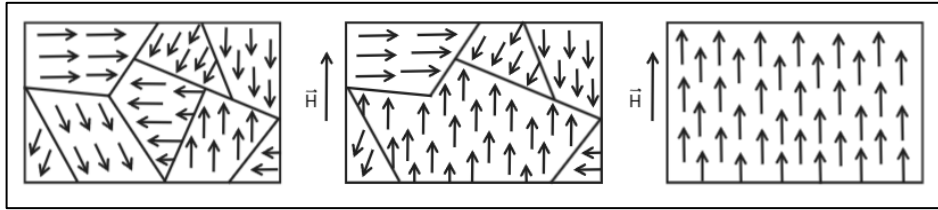
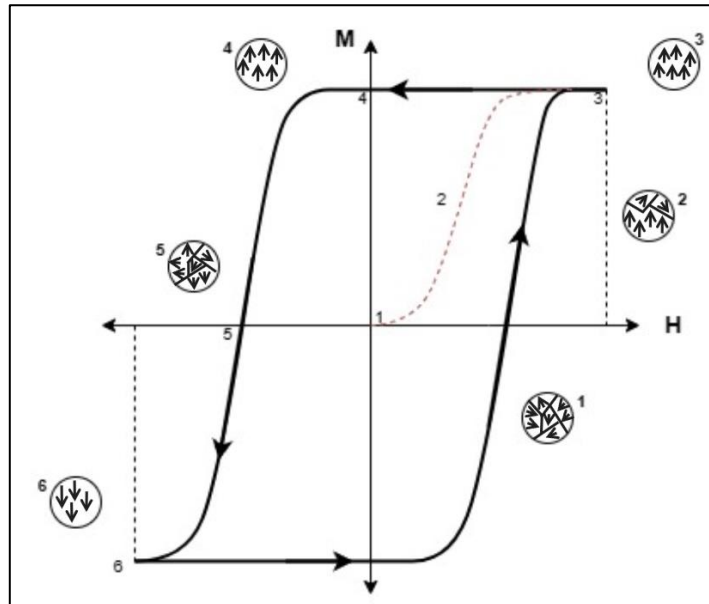


Figura 4. Comportamiento de los dominios magnéticos al aplicar un campo externo en una dirección determinada. Autoría propia

- Energía magnetostática (U_H): Esta es la energía asociada a la interacción del momento magnético intrínseco y el campo H . Es la energía almacenada por unidad de volumen del momento \vec{m}_s debido al campo externo aplicado.

Así, los dominios magnéticos son regiones dentro del material que muestran el comportamiento plasmado en la curva de histéresis (gráfica 3).



Gráfica 3. Comportamiento de los dominios magnéticos a lo largo del ciclo de histéresis. Autoría propia.

La existencia de los dominios ha sido comprobada desde el laboratorio, pero no se ha desarrollado una teoría que consolide en su totalidad la causa de este fenómeno, aun así, han surgido dos explicaciones que intentan dar cuenta de lo que ocurre en el material. La primera fue abordada con anterioridad y corresponde

a la Teoría de Weiss complementada por Heisenberg, la cual alude un campo molecular asociado a las interacciones entre los electrones cercanos, esta formulación corresponde a la energía interna del material, que, como se mencionó, causa la formación de los dominios. La segunda asocia la teoría de bandas, quien está relacionada con la energía magnetostática.

3.3. TEORÍA DE BANDAS

La teoría de bandas describe la configuración electrónica de los materiales como una estructura de bandas de energía. Surge de suponer que cuando se tiene una estructura cristalina con N átomos, los niveles de energía se solapan formando un conjunto continuo llamado **BANDA**. Es común encontrar tres bandas energéticas en los materiales, la **banda de valencia**, en la cual se encuentran los electrones de la última capa energética de los átomos de la red según el modelo de Bohr y son los encargados de formar enlaces atómicos, la **banda de conducción**, que es la responsable de la conducción eléctrica en el material, en ella están los electrones que se han desligado de su átomo y se encuentran libres pudiéndose mover fácilmente, y finalmente la **banda prohibida (GAP)**: es la diferencia de energía entre la parte superior de la banda de valencia y la parte inferior de la banda de conducción. La anchura de la banda prohibida es una medida de la dificultad para que un electrón de la banda de valencia salte a la banda de conducción, la cual está relacionada con la función trabajo del material. Cuanto mayor sea la anchura de la banda prohibida, más difícil será que los electrones se muevan libremente (Kittel, 1998).

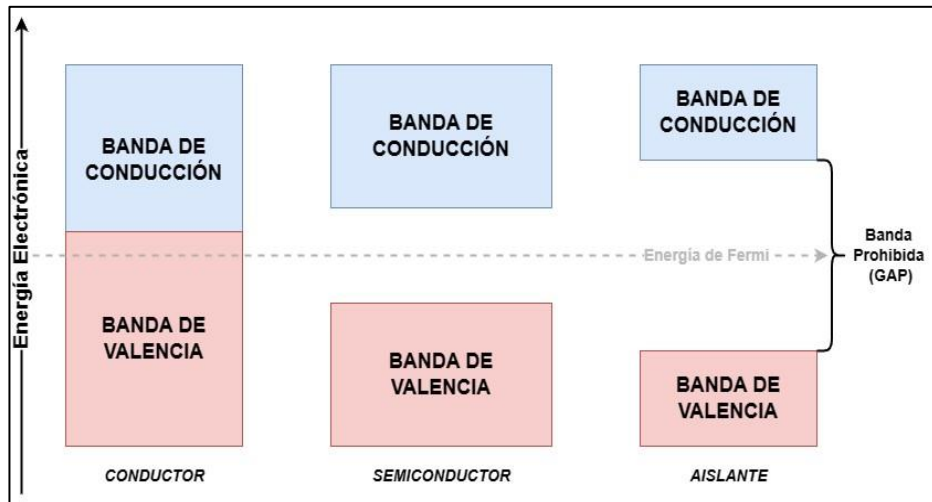


Figura 5. Bandas de energía de los diferentes tipos de material. Autoría propia.

Estas regiones determinan las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas de un material. Centrándose en las propiedades magnéticas y prestando especial atención a las bandas energéticas, las cuales permiten explicar la formación de los dominios en los materiales ferromagnéticos, que deben su existencia a la presencia de los electrones desapareados en la banda 3d y 4f, las cuales se forman al solapar sus niveles correspondientes (ver figura 3). Adicional, es de recordar que aquellos electrones que se encuentran apareados siguen el principio de exclusión de Pauli, ordenándose $\uparrow\downarrow$ en cada subnivel energético, por lo que el momento magnético intrínseco neto es cero; en consecuencia, los electrones en la banda 3d y 4f, junto a sus momentos magnéticos intrínsecos se encuentran distribuidos a lo largo del compuesto (Del Hoyo, 2005).

Para la teoría de bandas existen tres criterios para que un cristal presente un comportamiento ferromagnético (Durán Perdomo, 2017):

- *Los electrones responsables deben estar en bandas parcialmente llenas para que existan niveles de energía disponibles y los electrones con espines no apareados puedan moverse a estos niveles de energía.*

- *La densidad de los niveles en la banda debe ser alta, permitiendo que los niveles de energía puedan estar suficientemente cerca entre sí, de modo que casi se formen niveles de energía continuos y así, el aumento de energía causado por la alineación de los espines sea pequeño.*
- *Los átomos deben estar a la distancia correcta entre sí, de modo que la fuerza de intercambio pueda hacer que los espines electrónicos del nivel de energía d en un átomo se alineen con los espines en un átomo vecino.*

En otras palabras, el comportamiento magnético se debe a la presencia de electrones desapareados en una banda energética, para este caso en la banda 3d y 4f, lo que causa que el momento magnético neto sea diferente de cero, si se observa la figura 4, se encuentra que al aplicarse el campo magnético en la muestra existe una primera región que se orienta en sentido de este, lo que estaría relacionado con la primera afirmación de Durán; la segunda condición muestra que el sistema busca naturalmente el estado de mínima energía, en esta afirmación el autor refiere a la densidad de estados¹⁰ en el material, y finalmente el tercer ítem, indica que los momentos magnéticos del primer dominio formado, ahora influenciarán a los momentos de los átomos cercanos a la frontera causando la magnetización total de la muestra.

Hasta aquí se realizó una revisión del comportamiento ferromagnético de una muestra a partir de las condiciones energéticas que intervienen. En el siguiente capítulo se abordará la tercera energía vinculada con ferromagnetismo la cual depende la cristalografía del material.

¹⁰ Es el número existente de estados por cada nivel de energía. En este caso al tratarse de un sistema de muchos átomos, las energías accesibles forman un continuo (banda de energía) de modo que la densidad de estados formará también un continuo. La densidad de estados depende esencialmente del tipo de interacción del sistema.

4. CRISTALOGRAFÍA DE LOS IMANES DE NEODIMIO

En el apartado anterior se pudo ver la magnetización de los cuerpos ferromagnéticos a través de la revisión de las curvas de histéresis, que surgen gracias a la aparición de los dominios magnéticos, debido a que busca naturalmente el estado de mínima energía. Se ha dicho que existen cuatro energías que intervienen en la formación de los dominios, no obstante, se han comentado dos de ellas, la energía interna y la energía magnetostática. Justamente en esta sección se tratará la tercera energía, la energía magnetocristalina. La cuarta energía alude al coeficiente de deformación del material y se denomina energía de magnetostricción, la cual está relacionada con la deformación que sufre un material ferromagnético al ser sometido a un campo magnético externo, contrayéndose y dilatándose debido a la presencia de los dominios magnéticos, sin embargo, para el caso puntual del compuesto en el cual se centra el presente documento, esta energía es despreciable en comparación con las tres antes mencionadas, ya que el compuesto presenta una estructura rígida y por tal razón una energía de magnetostricción baja (Del Hoyo, 2005).

Antes de entrar en materia es necesario hablar sobre la estructura cristalina del compuesto determinado ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$), ya que en los imanes permanentes las propiedades ferromagnéticas se ven afectadas por su estructura cristalina.

Primero hay que recordar que un cristal se define como un sólido en el que se encuentran átomos, moléculas o iones de forma determinada y repetida. A esta forma repetida y ordenada se le llama red cristalina, cada red cristalina posee una celda unitaria diferente dependiendo del tipo de material que se trate. Una celda unitaria es la figura que se repite a lo largo del arreglo y es a partir de la cual se pueden analizar la geometría y simetría del cristal.

Para el caso puntual del compuesto $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, muestra una geometría tetragonal en la cual se cumple que dos de sus lados tienen la misma longitud, llamados constantes de red, y todos sus ángulos son de 90° como se muestra a continuación:

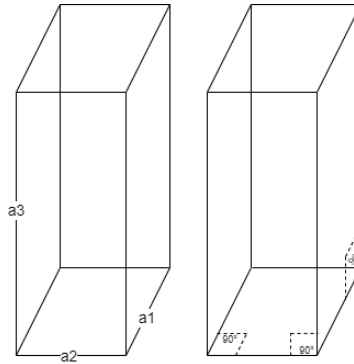


Figura 6. Cristal tetragonal. A la izquierda se muestra que $a_1=a_2 \neq a_3$, es decir dos lados son iguales en longitud. A la derecha $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, así los ángulos en un cristal tetragonal son iguales. Autoría propia.

Este compuesto tiene 68 átomos en total donde se encuentran 8 átomos de Neodimio, 4 átomos de Boro y 56 átomos de Hierro, cada uno se encuentra en una posición indicada dentro de la celda unitaria (ver figura 7).

Al tratarse de una celda tetragonal, esta tiene dos posibles características en el ordenamiento del compuesto tratado, la primera que cada uno de sus átomos ocupe un lugar determinado sin existir un átomo en el centro de la celda, y la segunda, que es el caso contrario, si es posible encontrar un átomo en el centro de la celda. El primer tipo es llamado *celda primitiva* y el segundo, *celda centrada en el cuerpo*.

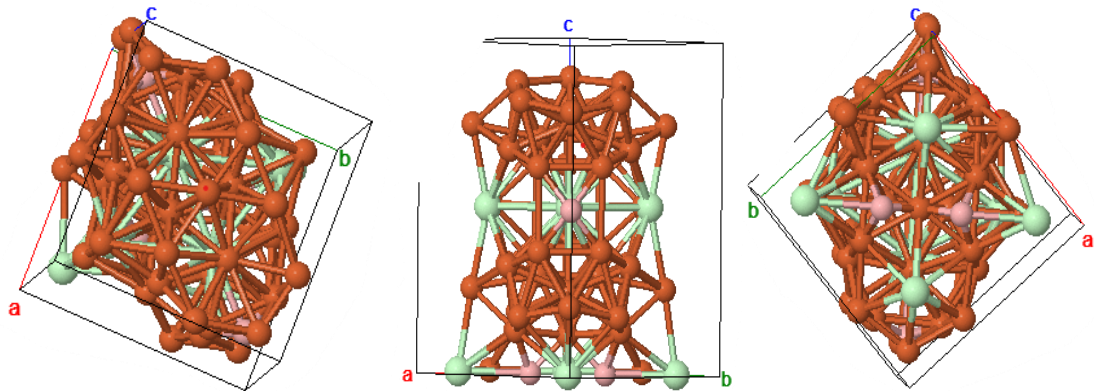


Figura 7. Celda primitiva del compuesto $Nd_2Fe_{14}B$ vista desde diferentes orientaciones. Tomada de (Ryan, 1993)

En la figura 7 se observa el Neodimio (verde), el Hierro (naranja) y el Boro (rosado). Se visualiza que el neodimio y el boro forman entre ellos un rombo, el cual cambia dependiendo de la posición, en la parte inferior (imagen de la derecha), se encuentra el Boro en el centro mientras que el rombo del medio el neodimio es quien está en el centro.

Ahora centrándose en la simetría de este imán permanente, según la notación de Hermann- Mauguin¹¹, corresponde a $P4_2/mnm$. La P significa que la celda unitaria que presenta es primitiva, el 4_2 muestra que este cristal tiene cuatro posibles rotaciones (rotar 90°) donde no se pierde la simetría, o en otras palabras que al rotarse 90° se ve de la misma forma, y dos traslaciones a lo largo del eje, en el caso de los cristales tetragonales coincide con el eje c. Finalmente m y n muestra el grupo de planos, en este caso m corresponde a dos planos de espejos posicionados sobre los vértices del paralelepípedo y n es un espejo diagonal (Quiroz , 2017).

Conocer tanto la geometría como la simetría del compuesto en general, ha permitido clasificar y estudiar las propiedades de cada uno, pero son

¹¹ Es la notación utilizada internacionalmente para identificar y representar los grupos de simetría en los cristales.

características que no se perciben simplemente con los sentidos, es por eso por lo que se analizan a través de una ley física propuesta por W.L. Bragg, la cual se explica más adelante.

Para comprender un poco más acerca de cómo se realiza la caracterización mediante el uso de la ley de Bragg, es importante aclarar que la difracción es un fenómeno óptico (figura 8) que sucede cuando una onda pasa por un obstáculo o abertura de longitud determinada (d), ocurre que la onda se divide luego de pasar la barrera y se propaga en todas las direcciones, sin embargo, mientras la onda dispersada viaja, habrá puntos donde interactúan unas con otras anulándose entre sí, obteniendo finalmente que quienes no se anularon en la trayectoria serán las que formarán un patrón, llamado patrón de difracción. Cuando las ondas se anulan entre ellas reciben el nombre de interferencia destructiva, aquellas en las que no se cancelan mutuamente, se les conoce como interferencia constructiva.

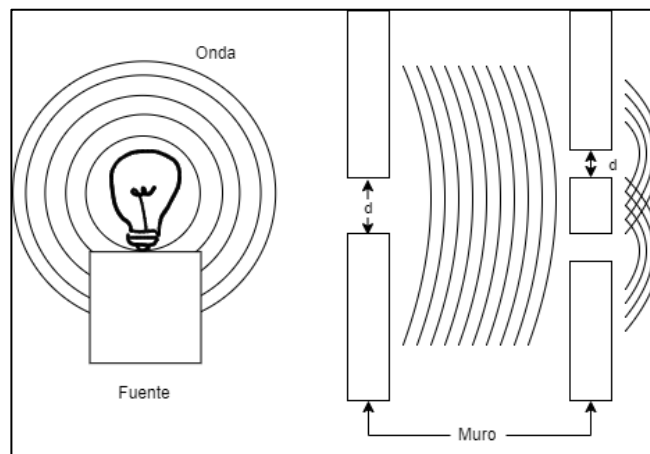


Figura 8. Difracción de onda, a través de dos obstáculos (muro). Autoría propia.

Para la caracterización de los cristales se hace uso de la difracción de rayos X, esto debido a que, para que se presente un patrón de interferencia similar al de la figura 8, es necesario que en tamaño de las aberturas sea del orden de la longitud de onda de los rayos X, generando así una rejilla de difracción, sin embargo, construir una rejilla de estas características es físicamente imposible, por tal

razón, dicha separación corresponde a las distancias de los átomos en la muestra, lo que se conoce como distancia interatómica y actúa como una rejilla de difracción para los rayos X. Esta técnica experimental aprovecha la ley de Bragg, que consiste en hacer incidir un haz de longitud determinada sobre los planos del cristal, cuando el rayo interactúa con la muestra este se refleja con un ángulo determinado hacia un detector, con el mismo ángulo con el que incide en el cristal, se busca que para un determinado ángulo tanto el haz incidente como el haz reflejado estén en fase, esto es, que se dé una interferencia constructiva, como se ve en la figura 9.

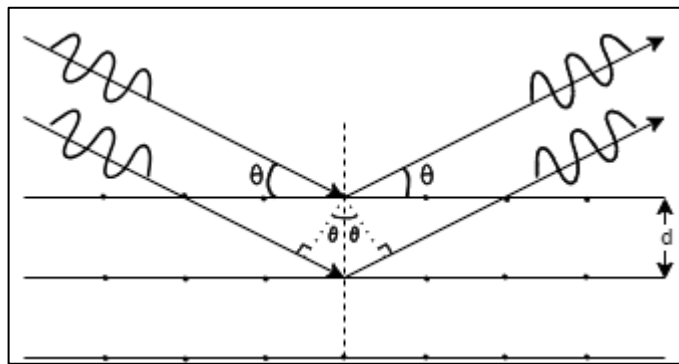
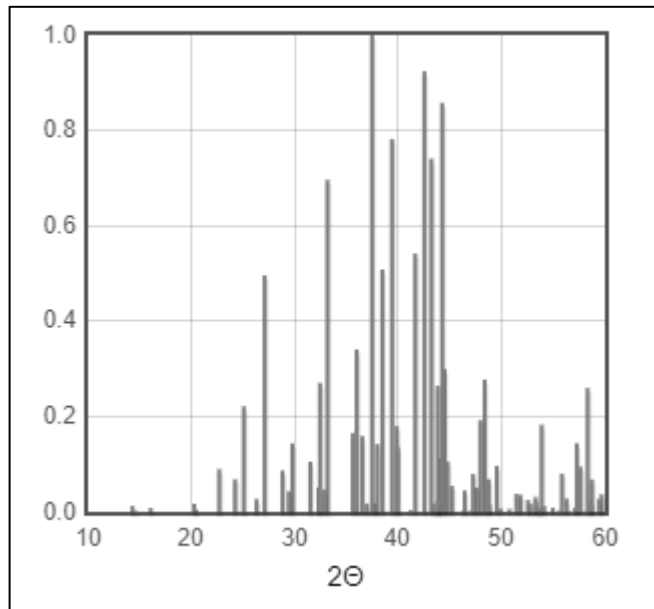


Figura 9. Diagrama de la ley de Bragg dentro de una red cristalina. Autoría propia.

Los resultados de la difracción son recolectados por detectores, dando lugar a un diagrama de difracción (gráfica 4), aquí se muestra la intensidad de rayos X difractados en función del ángulo 2θ , se considera este ángulo ya que muestra la suma de los ángulos del haz incidente y reflejado. En la gráfica obtenida se observarán ciertos picos que indican que en aquellos planos u orientaciones hay difracción, estos planos reciben el nombre de índices de Miller.



Gráfica 4. Picos de difracción del compuesto $Nd_2Fe_{14}B$. Tomado de (Ryan, 1993)

Los índices de Miller son planos o direcciones cristalográficas que permiten saber la posición de los átomos dentro de la red, y son representados por las letras h, k, l, debido a que se está en un espacio tridimensional. Cada plano se representa mediante el paréntesis circular así: $(h\ k\ l)$, en esta notación no se separan por comas el plano al que se hace referencia como usualmente se acostumbra. Para hacer el cálculo de estos índices se proponen los siguientes pasos:

1. Identificar el plano: Primero se visualiza la estructura cristalina en una celda unitaria. Luego se selecciona el plano de interés. Puede ser un plano principal como (100), (010), (001) o un plano diagonal como (111), (110), etcétera, como se muestra en la figura 10. Adicionalmente, se debe establecer un origen de coordenadas donde dicho origen no coincida con un punto del plano.
2. Intersecciones con los ejes: Ahora se determinan las intersecciones del plano con cada uno de los ejes cristalográficos (a, b, c), estas intersecciones pueden ser puntos específicos sobre los ejes o infinitos si el plano es paralelo a un eje.

3. Cálculo de inversos y reducción: Se calcula el inverso de cada coordenada de intersección elegida ($1/x$, $1/y$, $1/z$), si alguna intersección es infinito, su inverso es 0. Posteriormente se reducen los inversos a la fracción más simple con el mismo denominador (Mínimo Común Múltiplo).
4. Convertir a índices de Miller: Después cada punto obtenido en el paso anterior debe ser escrito como un número entero ($h k l$), por lo cual las fracciones halladas se deben multiplicar por el mínimo común múltiplo y estos valores finales son los llamados índices de Miller.
5. Consideraciones adicionales: En los índices de Miller puede haber números negativos, en ese caso, se coloca una barra sobre el número. Aquellos planos equivalentes, aquellos que son paralelos y tienen la misma distancia interplanar (d), tienen los mismos índices de Miller con diferente orden o signo.

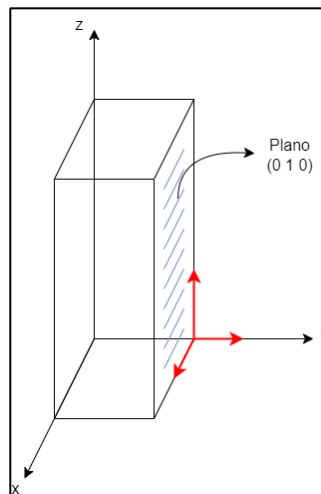


Figura 10. Uno de los índices de Miller para una red tetragonal. Autoría propia.

Retomando, al realizar la difracción de rayos X sobre el cristal, gráficamente se muestran los puntos máximos que indican en qué ángulo en particular sucede la interferencia constructiva, cada pico corresponde a un plano cristalino, es decir, dentro del material habrá direcciones donde algunas propiedades físicas como la

elasticidad, la conducción, el magnetismo, entre otras, cambiarán dependiendo de la orientación que tenga la muestra analizada, a esto se le conoce como **ANISOTROPÍA**.

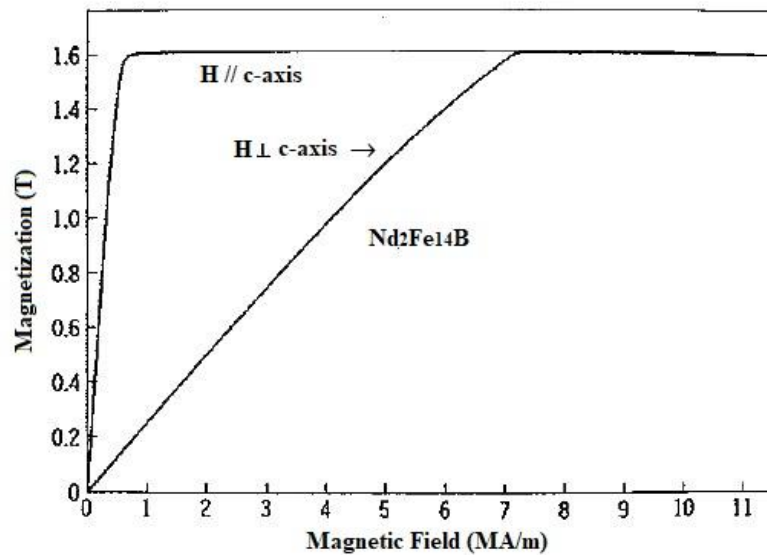
4.1. ANISOTROPÍA MAGNÉTICA

Como se mencionó la anisotropía es una característica de ciertos materiales, debido a que la distribución de sus átomos dentro de la red varía dependiendo de la dirección desde donde se observe, permitiendo que existan orientaciones privilegiadas, o en otras palabras, que maximicen las propiedades físicas (ópticas, magnéticas, eléctricas, etcétera...) del cristal. En una red tetragonal se manifiesta esta característica ya que al tener un lado más largo hace que su distribución atómica cambie a medida que se sitúa en un sentido determinado. Recordando que al inicio de este capítulo se citó que para la formación de los dominios magnéticos participan cuatro energías distintas, ahora se hablara de la tercera de ellas.

La anisotropía magnética, también conocida como energía magnetocristalina, es aquella en la que los momentos magnéticos se ordenan con mayor facilidad en dirección al campo magnético externo dependiendo de la orientación que tenga la red cristalina, dicho de otro modo, en la muestra existirá un eje de fácil magnetización y un eje de difícil magnetización a partir del sentido que se le otorgue al cristal. Para el caso puntual del $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, el eje favorable magnéticamente coincide con el lado más largo de la red, esto se debe a que allí se encuentra la mayor parte de átomos de Hierro, y como se nombró antes en la figura 7, se aprecian las dos diferentes distribuciones de los átomos de Boro y Neodimio.

Es de recordar que en el capítulo anterior, se dijo que la magnetización de un material está relacionada con la intensidad de campo magnético aplicado (H) y el

comportamiento de cada dipolo dentro del dominio. En ese sentido, si el campo externo se orienta paralelo al eje fácil, se asegura que la saturación magnética llegue a su punto máximo sin la necesidad de aplicar una intensidad de campo mayor, mientras que si se orientase perpendicularmente al eje fácil, la intensidad del campo debe ser mayor para lograr llegar a la saturación de la muestra, esto obedeciendo la búsqueda de mínima energía.



Gráfica 5. Magnetización vs. Intensidad magnética aplicada en un cristal de $Nd_2Fe_{14}B$. tomado de (Sagawa, Fujimura, Yamamoto, Matsuura, & Hirose, 1985)

En el gráfico 5, se observan dos curvas, la primera donde el campo magnético y el eje favorable son paralelos, curva superior, y en la segunda el campo y el eje fácil son perpendiculares, curva inferior. Como se observa, la primera curva necesita de un campo magnético menor para la muestra de $Nd_2Fe_{14}B$, en comparación con la segunda curva a pesar de saturar en el mismo valor magnetización.

La energía magnetocristalina (U_a) en una red tetragonal uniaxial se expresa así (Pérez Alcazar, 2016):

$$\frac{U_a}{V} = K_1 \sin^2 \theta$$

Donde K_1 es un coeficiente que depende de las características del material y la temperatura, en unidades de $\frac{J}{m^3}$, θ es el ángulo entre la orientación favorable y el vector magnetización (hacia donde apunta el campo externo) como se muestra en la figura 11 y V es el volumen del cristal. Esta expresión surge de la expansión en potencias de los cosenos directores en dirección al campo externo. Según W. Sagawa et.al (1985) el valor encontrado para K_1 a 300K del $Nd_2Fe_{14}B$ es de $4.5 \frac{MJ}{m^3}$.

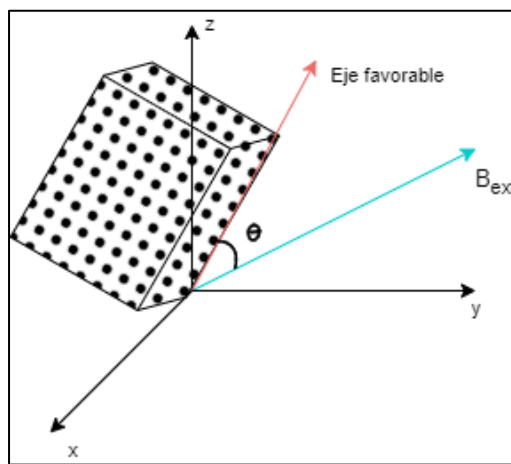


Figura 11. Anisotropía uniaxial de un cristal tetragonal. Autoría propia

Como se ve en la figura 11, si $\theta = 0^\circ$, 180° o 360° indicaría que tanto el campo externo como el eje favorable se encuentran paralelos, haciendo que la muestra sature más rápido sin la necesidad de aplicar un campo mayor.

En este capítulo se habló acerca de la anisotropía magnética presente en los materiales ferromagnéticos y en el compuesto analizado en este trabajo, ahora, en el siguiente capítulo se encuentra enunciado algunas aplicaciones de los imanes permanentes.

5. IMANES PERMANENTES Y APLICACIONES TECNOLÓGICAS

Como se ha referido desde el primer capítulo de este trabajo, los imanes permanentes han permitido realizar avances a nivel tecnológico, son componentes fundamentales en una amplia gama de aplicaciones tecnológicas que afectan positivamente nuestra vida cotidiana. Desde dispositivos electrónicos hasta aplicaciones industriales, los imanes permanentes desempeñan un papel crucial debido a sus propiedades magnéticas únicas. Aquí se abordarán algunas de las aplicaciones más comunes y sus ventajas:

- **Electrodomésticos:** Los imanes permanentes se utilizan en una variedad de electrodomésticos, como refrigeradores, lavadoras y secadoras. En estos dispositivos, los imanes son esenciales para el funcionamiento de motores eléctricos eficientes, estos motores consumen menos energía y son más duraderos gracias a los imanes permanentes, lo que se traduce en ahorros de energía y costos para los consumidores.
- **Tecnología de la información y comunicación:** En dispositivos como teléfonos móviles, tabletas y computadoras portátiles, los imanes permanentes se utilizan en los altavoces y en los motores de vibración. Esto permite la reproducción de sonido de alta calidad y la generación de vibraciones para notificaciones, mejorando la experiencia del usuario.
- **Generación de energía:** Los imanes permanentes desempeñan un papel importante en la generación de energía eléctrica en turbinas eólicas y generadores de energía hidroeléctrica. En las turbinas eólicas, los imanes permanentes se utilizan en los generadores para convertir la energía mecánica del viento en electricidad de manera eficiente. En los generadores hidroeléctricos, los imanes permanentes ayudan a generar electricidad a

partir de la energía del agua en movimiento. Estas aplicaciones contribuyen a la producción de energía limpia y renovable.

- **Transporte:** Los imanes permanentes se utilizan en vehículos eléctricos y en sistemas de transporte público como trenes de levitación magnética (maglev). En los motores de los vehículos eléctricos, los imanes permanentes proporcionan una alta eficiencia energética y un rendimiento mejorado en comparación con los motores tradicionales. En los trenes maglev, los imanes permanentes permiten la levitación y propulsión del tren sin fricción, lo que resulta en velocidades más altas y viajes más suaves.
- **Medicina:** En la medicina, los imanes permanentes se utilizan en dispositivos como resonancias magnéticas (IRM) para la visualización de tejidos y órganos internos con alta precisión. Además, se emplean en dispositivos de estimulación magnética transcraneal (EMT) para el tratamiento de trastornos neurológicos y psiquiátricos.

Como se ha visto hasta el momento los imanes permanentes han permitido avances a nivel tecnológico capaces de brindar beneficios a la sociedad, estas aplicaciones incluyen una mayor eficiencia energética, mayor durabilidad, menor mantenimiento, y en muchos casos, una mayor precisión y rendimiento. Pero ahora centrándose en aquellos imanes que poseen el compuesto aquí estudiado se tienen los discos **duros de computadora**. Los imanes de neodimio se utilizan en los discos duros de computadora para ayudar a leer y escribir datos en los platos magnéticos. Dentro de un disco duro, hay uno o más discos magnéticos recubiertos con material magnético. Estos discos giran a alta velocidad mientras un brazo de lectura/escritura se mueve sobre ellos. Este brazo está equipado con un cabezal magnético que utiliza un pequeño imán de neodimio ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) para generar un campo magnético focalizado y cambiar la polaridad del material magnético en el disco, lo que representa la escritura de datos. Para leer datos, el

cabezal magnético detecta las fluctuaciones en el campo magnético del disco, que se traducen en datos digitales. Cada parte del disco cumple una función que será detallada brevemente:

1. **Platos magnéticos:** Un disco duro consta de uno o varios platos magnéticos, que son discos metálicos recubiertos con una capa delgada de material magnético. Estos platos están montados en un eje y giran a altas velocidades dentro de la carcasa del disco duro.
2. **Brazos de lectura/escritura:** Sobre cada plato magnético hay uno o más brazos de lectura/escritura. Estos brazos son dispositivos mecánicos que se mueven de manera controlada sobre la superficie de los platos magnéticos. Al final de cada brazo hay un cabezal de lectura/escritura.
3. **Cabezales de lectura/escritura:** Cada cabezal de lectura/escritura está compuesto por una pequeña bobina y un imán de neodimio. El imán de neodimio crea un campo magnético focalizado que interactúa con el material magnético en la superficie del plato.
4. **Material magnético:** La superficie de cada plato magnético está recubierta con material magnético que puede ser magnetizado en dos direcciones diferentes, representando los valores binarios 0 y 1, que constituyen los datos almacenados.
5. **Proceso de lectura:** Cuando se necesita leer datos de un disco duro, el controlador del disco duro envía señales eléctricas a las bobinas de los cabezales de lectura/escritura. Estas señales hacen que los cabezales se muevan a la posición correcta sobre el plato magnético que contiene los datos solicitados. El imán de neodimio en cada cabezal crea un campo magnético que interactúa con el material magnético en la superficie del plato, generando así pequeñas corrientes eléctricas en las bobinas. Estas

corrientes se interpretan como datos binarios y se envían de vuelta al controlador del disco duro para su procesamiento.

6. **Proceso de escritura:** Cuando se necesita escribir datos en un disco duro, el controlador del disco duro envía señales eléctricas a las bobinas de los cabezales de lectura/escritura. Estas señales magnetizan el material magnético en la superficie del plato en la dirección deseada, representando los datos que se están escribiendo. El imán de neodimio en cada cabezal ayuda a generar un campo magnético suficientemente fuerte y focalizado para realizar esta operación con precisión.

Hasta aquí se presentan algunas aplicaciones tecnológicas que tienen los imanes permanentes y algunas en las que intervienen el compuesto trabajado a lo largo del documento. Es evidente que dichas aplicaciones no son las únicas, además es de resaltar que el estudio de materiales compuestos de tierras raras actualmente está en auge, gracias a los avances acelerados de la tecnología y a la búsqueda de dispositivos más estables y compactos.

CONCLUSIONES

- La teoría de bandas aporta al estudio del fenómeno de magnetización permanente ya que brinda un punto de vista complementario adicional a los abordados en los cursos de Electromagnetismo II y cursos avanzados de la Licenciatura en Física de la Universidad Pedagógica Nacional. Al disponer de esta alternativa, los maestros en formación adquieren una herramienta adicional para comprender las curvas de histéresis desde ámbitos pertenecientes a las consideraciones modernas.
- Al analizar la estructura cristalina del $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, permitió identificar que los imanes permanentes compuestos de tierras raras presentan un ordenamiento en la red que promueve que la magnetización se presente con una mayor eficiencia dependiendo de la orientación que se le dé al cristal en relación con el campo magnético externo al que la muestra fue sometida, dicha orientación se denomina eje fácil o eje favorable. Además, el estudio del ordenamiento de los átomos en la red permitió comprender que evidentemente el aporte de los electrones del átomo de hierro y los electrones del orbital 4f del neodimio son los que generan el fenómeno de magnetización permanente, el estudio y comprensión de estos promueve avances tecnológicos acelerados.
- Desde el inicio del documento se partió de la vorágine tecnológica que actualmente existe, en parte, gracias al estudio riguroso de los imanes de neodimio y las tierras raras, sin embargo, a pesar de la extensión límite del documento, se hizo evidente que el estudio de los imanes permanentes y las tierras raras ha permitido explorar avances a nivel tecnológico en diversos ámbitos en la sociedad, donde se ha buscado aprovechar sus propiedades al máximo, aun así, si se analizase con mayor detenimiento la estructura y comportamiento de los lantánidos, o en el caso más general,

cualquier elemento de la tabla periódica, sería posible exponer y conocer con más detalle las propiedades que pueden ser usadas para el bienestar humano, de fauna y de flora.

- Al realizar una revisión de los antecedentes del trabajo y en el transcurso del desarrollo del mismo, se logró identificar que existe escasa bibliografía que unifique el estudio del fenómeno de magnetización en materiales ferromagnéticos compuestos de tierras raras, a partir del análisis y la comprensión de la formación de bandas con el estudio de la estructura cristalina del compuesto abordado a lo largo del escrito, por tal razón en presente trabajo permite que los futuros licenciados en física aborden y comprendan este fenómeno en un documento que intenta trabajar las explicaciones desde un enfoque divulgativo, sin dejar de lado la matematización. Además, y debido a que las aplicaciones tecnológicas se abordaron a modo de conclusión de forma superficial, el presente trabajo queda como base para que los maestros en formación puedan continuar con la investigación y enriquecer el enfoque del trabajo, además de generar un aumento en los documentos de consulta.

BIBLIOGRAFÍA

- Aguilar Peris, J. (2002). Las ciencias físico-químicas y su enseñanza. *Arbor*, 153-163.
- Calvo, A. G. (1984). De la naturaleza de las cosas. En L. Caro, *De rerum natura* (págs. 396-403). Fuenlabrada, Madrid: Hyspamerica.
- Ching, W. Y., & ZongQuan, G. (1987). Electronic structure of Nd₂Fe₁₄B. *Journal of Applied Physics*, 2-3.
- Coso, O., Endere, M., Gangui, A., Gattone, A., Martini, J., Nabel, P., . . . Villavicencio, S. (s.f.). *El modelo de Heisenberg*. Obtenido de Ciencia hoy: <https://www.cienciahoy.org.ar/ch/ln/hoy59/modeloheisenberg.htm#:~:text=El%20modelo%20de%20Heisenberg&text=Es%20aquel%20en%20el%20cual,de%20los%20momentos%20magn%C3%A9ticos%20individuales>
- Daum Machado, K. (2002). Magnetização de Meios Ferromagnéticos. En *Teoria do Electromagnetismo* (Vol. II, págs. 515-533). Ponta Grossa-Paraná, Brasil: UEPG.
- Del Hoyo, A. d. (Noviembre de 2005). Modelación de la histéresis magnética y su aplicación al cálculo numérico en máquinas eléctricas. 13-44. BARCELONA-SORIA.
- Departamento de Física-Facultad de Ciencias Físicas. (s.f.). Estados electrónicos y bandas de energía. Cristal unidimensional. *Laboratorio de Física del Estado Sólido*, 4-6 & 12-14. Madrid, España: Universidad Complutense.
- dos Santos Filho, A. (Agosto de 2016). PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO MODELO DE HEISENBERG NAS APROXIMAÇÕES DE CAMPO MÉDIO E EFETIVO. *Tese de doutorado*. São Cristóvão, Brasil.
- Durán Perdomo, J. F. (2017). ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE NANO PARTÍCULAS DE NdFeB PRODUCIDAS POR MOLIENDA ASISTIDA POR SURFACTANTES. *Tesis*. Santiago de Cali.
- Echeverry Naranjo, C. E. (10 de Abril de 2018). Caracterización magnética y estructural de nanopartículas de Nd₂Fe₁₄B sintetizadas con micropartículas de Fe₉₃Si₇. *Tesis*. Valle del Cauca, Cali, Colombia: Universidad del Valle.
- Eckert, M. (2013). Arnold Sommerfeld: Science, Life and Turbulent Times 1868-1951. *Springer Nature*.
- Función de Brillouin y aplicación de la ley de Curie-Weiss*. (02 de 03 de 2010). Obtenido de Buenas Tareas: <https://www.buenastareas.com/ensayos/Funcion-Brillouin/145559.html>
- Gil, D., Senent, F., & Solbes, J. (1986). Análisis crítico de la introducción a la física moderna en la enseñanza media. *Revista de enseñanza de la física*, 16-21.
- Givord, D., Li, H., & Moreau, J. M. (1984). MAGNETIC PROPERTIES AND CRYSTAL STRUCTURE OF Nd₂Fe₁₄B. *Solid State Comanunications*, 1-3.
- Gore, J. C. (2003). Principles and practice of functional MRI of the human brain. *Perspective series*, 1-4.

- Hangzhou Tengye Materiales magnéticos Co., Ltd. (s.f.). *Imanes SmCo*. Obtenido de TENGYE. Empowering you with magnets:
<https://tymagnets.com/es/PRODUCTO/smco-imaner/>
- Imán de neodimio*. (13 de Noviembre de 2023). Obtenido de Wikipedia, La enciclopedia libre.:
https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Im%C3%A1n_de_neodimio&oldid=155322280
- Keller, P. J. (1990). Basic Principles of Magnetic Resonance Imaging. Obtenido de GE Medical System .
- Kittel, C. (1998). Introducción a la física del estado sólido. En C. Kittel, *Introducción a la física del estado sólido* (págs. 1-33 y 471-591). Barcelona: Editorial Reverté, S.A.
- Larotonda, M. (2021). *Ferromagnetismo – Temperatura de Curie*. Obtenido de Laboratorio 4 B – 2do Cuatrimestre 2021:
<http://materias.df.uba.ar/l4b2021c2/ferromagnetismo-temperatura-de-curie/>
- Lopez, R. (s.f). HISTORIA DEL ELECTROMAGNETISMO. *Cero espin*, 2-3.
- Martinez Montemayor, S. (Abril de 2006). Centro de investigación en química aplicada. *Materiales magnéticos puros, compuestos e híbridos*. Saltillo.
- Martinez-Chavanz, R. (2004). La recepción de la física moderna en Colombia. *Saber y tiempo. Revista de historia de la ciencia*, 41-70.
- Minecan, A. M. (2017). Análisis y traducción bilingüe de la carta de Pedro el Peregrino de Maricourt al caballero Siger de Foucaucourt: Sobre el imán (De magnete). *DISPUTATIO. PHILOSOPHICAL RESEARCH BULLETIN*, 287-298.
- Ministerio de Educación Nacional (MEN). (2006). Estándares Básicos de Competencias en Lenguaje, Matemáticas, Ciencias y Ciudadanas. *Revolución educativa Colombia aprende*, 140-141. Obtenido de 1140-142:
https://www.mineducacion.gov.co/1621/articles-340021_recurso_1.pdf
- Modelo de Ising*. (20 de Abril de 2023). Obtenido de Wikipedia, La enciclopedia libre:
https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Modelo_de_Ising&oldid=150671924.
- Moebes, W., Ling, S., & Sanny, J. (17 de Noviembre de 2021). *8.2 Momento dipolar magnético orbital del electrón*. Obtenido de OpenStax:
<https://openstax.org/books/f%C3%ADsica-universitaria-volumen-3/pages/8-2-momento-dipolar-magnetico-orbital-del-electron>
- MOLINA DOMÍNGUEZ, B. (6 de Julio de 2017). RESONANCIA MAGNÉTICA DE IMAGEN PARA EL DIAGNÓSTICO DE DEFICIENCIAS OCULARES. Sevilla, España.
- Mottelay, P. F. (1893). Laodstone and magnetic bodies and on the great magnet the Earth . En W. Gilbert, *De Magnete* (págs. 275-308). Londres: Bernard Quaritch.
- Nava, P. (s.f.). *Materiales Magnéticos*. Obtenido de
<https://www.kimerius.com/app/download/5783167773/Materiales+magn%C3%A9ticos.pdf>
- Navarro, E. (s.f.). Tema 1e: Electrones itinerantes: Magnetismo en metales. *TEMA 1: ORIGEN Y TIPOS DE MAGNETISMO*. Manizales, Colombia. Obtenido de

- <https://www.cartagena99.com/recursos/alumnos/apuntes/Tema%201e-%20Magnetismo%20en%20metales.pdf>
- Néel, M. L. (1959). LE CHAMP MOLECULAIRE LOCAL. *CENTRE D'ÉTUDES NUCLÉAIRES DE SACLAY*, 1-17.
- Nobel Prize. (04 de 10 de 2022). *Enrico Fermi- Biografía*. Obtenido de Premio Nobel Outreach AB 2022:
<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1938/fermi/biographical/>
- Oster, N. (2012). Generation and Characterization of Anisotropic Microstructures in. 4-21.
- Perafán Herrera, J. P. (2019). ESTUDIO DE PROPIEDADES MAGNÉTICAS Y ESTRUCTURALES DE LAS ALEACIONES Nd₂Fe₁₄B Y Fe₉₃Si₇ PRODUCIDAS POR ALEAMIENTO MECÁNICO CON SURFACTANTE. *Tesis de maestría*. Ibagué-Tolima, Colombia.
- Pérez Alcazar, G. A. (2016). Imanes permanentes: características, aplicaciones y futuro. *Revista Académica de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 1-7.
- Quiroz, H. G. (2017). DRX – Notación y Grupos Espaciales. *Grupo de Materiales Nanoestructurados y sus aplicaciones*, 9-25.
- R. Castellanos, R. F.-V. (2011). Cálculo de la concurrencia para el modelo de Heisenberg. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 2- 4.
- Ruiz Saldarriaga, E. (2013). EFECTO DE ALTAS CONCENTRACIONES DE NÍQUEL EN LAS PROPIEDADES MAGNÉTICAS Y ESTRUCTURALES DE LA ALEACIÓN Nd₁₆Fe₇₆B₈. *Tesis*. Santiago de Cali.
- Ryan, D. A. (1993). Cobalt site preferences in iron rare-earth-based compounds. *Physical Review, Serie 3. B - Condensed Matter (18,1978-)*, 47. Obtenido de The Open Quantum Materials Database: <https://oqmd.org/materials/structure/9912306>
- Saéz Puche, R., Cascales, C., Porcher, P., & Maestro, P. (2000). Tierras raras: materiales avanzados. *Anales de la Real Sociedad Española de Química*, 19-21.
- Sagawa, M., Fujimura, S., Yamamoto, H., Matsuura, Y., & Hirosawa, S. (1985). Magnetic Properties of rare-earth-iron-boron permanent magnets materials. *Journal of Applied Physics*, 2-3.
- Sagawa, M., Hirosawa, S., Yamamoto, H., Fujimura, S., & Matsuura, Y. (1987). Nd-Fe-B Permanent Magnet Materials. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2-6.
- Susner, M. A., Conner, B. S., Saporov, B. I., McGuire, M. A., Crumlin, E. J., M. Veith, G., . . . Sales, B. C. (2015). Growth and Characterization of Ce- Substituted Nd₂Fe₁₄B Single Crystals. 2-8.
- Tagüeña, J., & Martina, E. (Mayo de 1986). *I. Aspectos Históricos: Orígenes y desarrollo de la teoría del magnetismo*. Obtenido de Biblioteca Digital:
<https://www.zschimmer-schwarz.es/noticias/mayores-avances-tecnologicos-quimica-2021-que-esperar-2022/>
- Tanaka, S., Moriya, H., Tsuchiura, H., Sakuma, A., Divis, M., & Noák, P. (2011). First-principles calculation of crystal field parameters of Dy ions substituted for Nd in Nd-Fe-B. *Journal of Physics*, 3.

- Teoría de bandas*. (12 de Noviembre de 2023). Obtenido de Wikipedia, La enciclopedia libre: https://es.wikipedia.org/wiki/Teor%C3%ADa_de_bandas
- Teoría del campo molecular*. (2021). Obtenido de frwiki.wiki: https://es.frwiki.wiki/wiki/Th%C3%A9orie_du_champ_mol%C3%A9culaire
- UNESCO. (2005). ¿Cómo promover el interés por la cultura científica? *Década e la educación para el desarrollo sostenible declarada por las Naciones Unidas*, 123-140.
- Vilches, A., & Furió, C. (1999). Ciencia, tecnología y sociedad: Implicaciones en la educación científica para el siglo XXI. *La Habana: Academia*, 1-13.
- Wang, J., Liang, L., Zhang, L., Sun, L., & Hirano, S. (2014). Deduction of the chemical state and the electronic structure of Nd₂Fe₁₄B compound from X-ray photoelectron spectroscopy core-level and valence-band spectra. *Journal of Applied Physics*, 1-9.
- Wayback Machine. (24 de 10 de 2017). *Humphry Davy*. Obtenido de Wayback Machine Internet Archive: <https://web.archive.org/web/20090204071419/http://www.chemicalheritage.org/classroom/chemach/electrochem/davy.html#>
- ZSCHIMMER & SCHWARZ ESPAÑA. (12 de 01 de 2022). *LOS MAYORES AVANCES TECNOLÓGICOS DE LA QUÍMICA EN 2021 Y QUÉ ESPERAR DE 2022*. Obtenido de ZSCHIMMER & SCHWARZ ESPAÑA: <https://www.zschimmer-schwarz.es/noticias/mayores-avances-tecnologicos-quimica-2021-que-esperar-2022/>

ANEXOS

Anexo A. Demostración de la función de Brillouin

Para explicar el comportamiento magnético de los materiales que no son diamagnéticos, se parte del análisis paramagnético donde se incluye el momento angular total ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$), donde \vec{L} es el momento orbital y \vec{S} es el momento de espín, este último explicado en el capítulo 3 de este trabajo.

El momento dipolar paramagnético, es el producto entre la razón giromagnética o razón magnetogírica, quien es una proporción entre el momento angular total y el momento magnético de cada electrón en la muestra, esta expresada por $\gamma = \frac{gQ}{2m}$, y \vec{J} , tal que

$$\vec{m} = \frac{ge}{2m} \vec{J}$$

Donde g es el factor de Landé, m la masa del electrón y e la carga del electrón. Recordando que el momento magnético de los electrones también está relacionado con el magnetón de Bohr ($\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$), la expresión anterior queda descrita

$$\vec{m} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{J} \quad (A.0)$$

Al igual que S en la sección 3, J se encuentra cuantizado, es decir que puede ser expresado de la siguiente forma

$$J = m\hbar$$

Donde m es un número entero, el cual puede asumir los valores de $m = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$, teniendo un total de posibilidades de $2J + 1$. a su vez J está asociado con el módulo del momento angular, quien puede tomar valores enteros como $J =$

$0, 1, 2, \dots, 0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$. Si se orienta el campo magnético externo en dirección al eje z y sustituyéndose el valor de J , se tiene para la expresión (A.0)

$$m_z = g\mu_B m \quad (A.1)$$

La solución anterior es válida para un dipolo magnético, al tratarse de una cantidad discreta de dipolos los que se encuentran en la muestra magnetizada, se emplea la sumatoria para establecer cada momento dipolar, así mismo se considera el valor medio de m_z . Se conoce que, para encontrar este valor medio, su caso general es

$$\langle x \rangle = \frac{\sum x \cdot P(\xi)}{\sum P(\xi)} \quad (A.2)$$

Donde $P(\xi) = Ae^{-\beta\xi}$, con ξ en este caso como la energía potencial debida al torque que experimenta cada dipolo, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ y $A = 1$. Recordando que la energía potencial es

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B}$$

Como se indicó anteriormente, si se orienta el campo en sentido del eje z y se cambia la expresión de \vec{B} en su equivalente con \vec{H} se obtiene la siguiente expresión para la energía potencial en sentido del eje aplicado

$$U_z = -g\mu_B\mu_0 m H_z$$

Así la expresión (A.2) queda descrita como

$$\langle m_z \rangle = \frac{\sum_{m=-J}^J m g \mu_B e^{\beta g \mu_B \mu_0 m H_z}}{\sum_{m=-J}^J e^{\beta g \mu_B \mu_0 m H_z}}$$

La solución anterior se puede reescribir utilizando el logaritmo tal que

$$\frac{\partial}{\partial H_z} \left\{ \ln \sum_{m=-J}^J e^{\beta g \mu_B \mu_0 m H_z} \right\} = \beta \mu_0 \frac{\sum_{m=-J}^J m g \mu_B e^{\beta g \mu_B \mu_0 m H_z}}{\sum_{m=-J}^J e^{\beta g \mu_B \mu_0 m H_z}}$$

Resolviendo y despejando $\langle m_z \rangle$

$$\langle m_z \rangle = \frac{1}{\beta \mu_0} \frac{\partial}{\partial H_z} \left\{ \ln \sum_{m=-J}^J e^{\beta g \mu_B \mu_0 m H_z} \right\}$$

Ahora sustituyendo $x = \beta g \mu_B \mu_0 H_z J$

$$\langle m_z \rangle = \frac{1}{\beta \mu_0} \frac{\partial}{\partial H_z} \left\{ \ln \sum_{m=-J}^J e^{\frac{mx}{J}} \right\} \quad (A.3)$$

Esta sumatoria corresponde a una progresión geométrica finita que corresponde a, $S_n = \frac{a_0(1-r^n)}{1-r}$, donde $n = 2J + 1$, $r = e^{\frac{mx}{J}}$ y $a_0 = e^{-x}$. Finalmente, luego de resolver la progresión, la sumatoria en la expresión (A.3) queda resuelta así

$$\sum_{m=-J}^J e^{\frac{mx}{J}} = \frac{e^{\frac{(2J+1)x}{2J}} - e^{-\frac{(2J+1)x}{2J}}}{e^{\frac{x}{2J}} - e^{-\frac{x}{2J}}}$$

Siguiendo con la expresión para el seno hiperbólico $[\sinh \theta = \frac{e^\theta - e^{-\theta}}{2}]$ y se aplica en la solución anterior, se tiene para la expresión (A.3)

$$\langle m_z \rangle = \frac{1}{\beta \mu_0} \frac{\partial}{\partial H_z} \left\{ \ln \frac{\sinh \frac{2J+1}{2J} x}{\sinh \frac{x}{2J}} \right\} \quad (A.4)$$

Como la ecuación para el valor medio m_z , está en términos de x , es conveniente dejar la derivada parcial en función de esta variable, haciendo uso de la regla de la cadena y resolviendo queda

$$\frac{\partial}{\partial H_z} = \frac{\partial x}{\partial H_z} \frac{\partial}{\partial x} ; \quad \frac{\partial}{\partial H_z} = g \beta \mu_0 \mu_B J \frac{\partial}{\partial x}$$

Reemplazando el valor encontrado para $\frac{\partial}{\partial H_z}$ en la ecuación (A.4) y siguiendo las propiedades de los logaritmos en una división, se tiene para $\langle m_z \rangle$

$$\langle m_z \rangle = g\mu_B J \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \ln \sinh \left(\frac{2J+1}{2J} x \right) - \ln \sinh \left(\frac{x}{2J} \right) \right\}$$

Finalmente, al derivar con respecto a x y al simplificar usando las identidades hiperbólicas cociente se tiene

$$\langle m_z \rangle = g\mu_B J \left\{ \left(1 + \frac{1}{2J} \right) \coth \left(1 + \frac{1}{2J} \right) x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J} \right\}$$

Donde la solución dentro del corchete corresponde a la función de Brillouin mencionada en el capítulo 3.1. Resumiéndose que el valor medio del momento dipolar es

$$\langle m_z \rangle = g\mu_B J B_J(x) \quad (A.5)$$

Lo anterior expresa el comportamiento de cada dipolo al ser sometido a un campo magnético, el cual se considera como un valor medio, en donde se relaciona el momento angular total (J), el magnetón de Bohr y la función antes mencionada.

Si un material paramagnético es expuesto a temperaturas bajas o a un campo magnético intenso x será mucho mayor a 1, provocando que la $\coth = 1$, es decir la función de Brillouin quedará

$$B_J(x) = 1 + \frac{1}{2J} - \frac{1}{2J} ; B_J(x) \approx 1 \quad (A.6)$$

Así, entonces, el momento dipolar sería

$$\langle m_z \rangle = g\mu_B J \quad (A.7)$$

Esta expresión corresponde al valor de saturación en un material paramagnético, ya que expresa el valor máximo de su momento magnético. Ahora si se considera el caso donde $x \ll 1$, el valor de la cotangente hiperbólica tendera a ser $\frac{1}{3} + \frac{x}{3}$, por tal razón $B_J(x)$ es expresada

$$B_J(x) = \frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{J} \right) x$$

Es decir, si $x \ll 1$ el momento dipolar queda

$$\langle m_z \rangle = g\mu_B J \frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{J} \right) \beta g\mu_B \mu_0 H_z J ; \langle m_z \rangle = \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B T} H_z \quad (A.8)$$

Lo anterior corresponde a un material paramagnético, sin embargo, en el caso estudiado en el presente trabajo de grado se trata un material ferromagnético, aunque el tratamiento es similar, es necesario aludir la contribución magnética al espín S en lugar del momento angular total J , en otras palabras y como ha sido mencionado a lo largo del trabajo, la causa del ferromagnetismo es debida al momento dipolar intrínseco quien a su vez esta relacionado con el espín del electrón.

Para el tratamiento ferromagnético, al igual que en el paramagnetismo se parte de considerar el valor medio del momento dipolar, en este caso el intrínseco quien tendrá asociada una energía total expresada por

$$U_{total} = -g\mu_0\mu_B m(H + H_m)$$

Donde H_m es el campo molecular de Weiss y H es la intensidad del campo magnético aplicado, así mismo la variable x definida arriba será

$$x = g\beta\mu_0\mu_B S(H + H_m) \quad (A.9)$$

En este caso, a diferencia del paramagnetismo se tienen dos intensidades de campo, uno externo y otro debido a interacciones internas, no obstante, como el campo molecular es el único valor que se desconoce de la expresión se debe encontrar su valor en términos de las variables conocidas, con el fin de que el valor medio del momento intrínseco quede expresado en función de las incógnitas definidas. Para ello se debe identificar la ecuación 8 del capítulo 3, donde se expresa el campo molecular de la siguiente forma

$$J \sum_{i=1}^n S_{zj} = \frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_m$$

Si se considera el valor medio de S_{zj} y se define que este es independiente de j , la solución anterior es

$$nJ\langle S_z \rangle = \frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_m \quad (A.10)$$

Ahora, al igual que en lo anteriormente visto el momento intrínseco puede escribirse en función de S , el cual se describe como

$$\langle m_s \rangle = \frac{g\mu_B}{\hbar} \langle S_z \rangle \quad (A.11)$$

Donde $\langle S_z \rangle$ es el valor medio del espín del electrón, se puede hacer esta igualdad debido a que en la ecuación anterior es la variable que cambia en comparación con las demás, que son constantes. Además, como se mostró en la ecuación (A.5) el valor medio en términos de la función de Brillouin para el caso ferromagnético es

$$\langle m_s \rangle = g\mu_B S B_S(x) \quad (A.12)$$

Igualando las ecuaciones (A.11) y (A.12), y despejando el valor promedio del espín

$$\langle S_z \rangle = \hbar S B_S(x)$$

Retomando la expresión (A.10) y sustituyendo el valor encontrado para el espín

$$nJ\hbar S B_S(x) = \frac{g\mu_0\mu_B}{\hbar} H_m \quad (A.13)$$

Si se expresa el valor del campo molecular, despejándolo de la ecuación (A.9) y se sustituye en la solución (A.13), finalmente la función de Brillouin se deja expresada así

$$B_S(x) = \frac{g\mu_0\mu_B}{n\hbar^2 JS} \left(\frac{x}{g\beta\mu_0\mu_B S} - H \right)$$

$$B_S(x) = \frac{k_B T}{nJS^2 \hbar^2} \left(x - \frac{g\mu_0 \mu_B SH}{k_B T} \right) \quad (A.14)$$

Anexo B. Demostración Temperatura de Curie

Como se indicó en el documento, la particularidad del ferromagnetismo se debe a la existencia de una temperatura crítica, donde la organización de los dipolos en el sentido del campo externo haciéndole perder sus propiedades magnéticas permanentes, en este anexo se mostrará la deducción de la expresión de la temperatura crítica.

Para comenzar hay que recordar que la magnetización media de cualquier cuerpo esta dada por

$$\langle M \rangle = N \langle m \rangle$$

Donde M corresponde a la magnetización neta de la muestra, m es el momento dipolar magnético, en este caso $\langle m_s \rangle$ y N el número total de partículas.

Recordando el valor medio encontrado para m_s en la ecuación (A.12), se tiene

$$\langle M \rangle = Ng\mu_\beta SB_S(x) \quad (B.0)$$

Como se dijo en el caso paramagnético, cuando $x \ll 1$ la función de Brillouin toma la expresión

$$B_S(x) = \frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{S} \right) x \quad (B.1)$$

Al tratarse de un material ferromagnético se hace la sustitución de J por S . Si se considera que el campo magnético externo es igual a cero, es decir se ha apagado el campo, la solución para la $B_S(x)$ sería

$$B_S(x) = \frac{k_B T}{nJS^2 \hbar^2} x \quad (B.2)$$

Tanto en (B. 1) como en (B. 2) si $x = 0$, $B_S(x) = 0$, por ende $\langle M \rangle = 0$, lo que quiere decir que se presenta una magnetización espontánea en el material. Sucede que la ecuación (A. 14) es una recta que tiene una inclinación determinada, el cual indica el punto límite en el que la función de Brillouin es diferente de cero, es decir, que la magnetización no es nula. En ese sentido la pendiente $\frac{k_B T}{nJS^2 \hbar^2} x$ debe ser menor al valor de la ecuación (B. 1).

Si se igualan las ecuaciones (B. 1) y (B. 2) se tiene que

$$\frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{S} \right) > \frac{k_B T}{nJS^2 \hbar^2}$$

Resolviendo el paréntesis y despejando la temperatura

$$T < \frac{nJS(S+1)\hbar^2}{3k_B}$$

Así, finalmente

$$T_c = \frac{nJS(S+1)\hbar^2}{3k_B}$$

Donde T_c es la temperatura de Curie discutida en el capítulo 3. Ahora si se igualan las expresiones (A. 14) y (B. 1) se llega

$$\frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{S} \right) = \frac{k_B T}{nJS^2 \hbar^2} \left(x - \frac{g\mu_0\mu_B SH}{k_B T} \right)$$

Resolviendo los paréntesis

$$\frac{nJS(S+1)\hbar^2 - 3k_B T}{3nJS^2 \hbar^2} x = -\frac{g\mu_0\mu_B H}{nJS \hbar^2}$$

Recordando el valor de la temperatura crítica, se puede reducir la expresión a

$$\frac{3k_B T_c - 3k_B T}{3nJS^2 \hbar^2} x = -\frac{g\mu_0\mu_B H}{nJS \hbar^2}$$

Entonces la expresión para $B_S(x)$ es

$$B_S(x) = \frac{1}{3} \frac{g\mu_0\mu_\beta(S+1)H}{k_B(T-T_c)}$$